清华大学学术专著

量子力学的前沿问题

（第2版）

张礼 葛墨林 编著



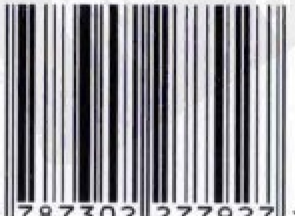
清华大学出版社

清华大学出版社数字出版网站

WQBook 书文局泉

www.wqbook.com

ISBN 978-7-302-27792-7



定价：118.00元

清华大学学术专著

量子力学的前沿问题

（第2版）

张礼 葛墨林 编著



清华大学出版社
北京

内容简介

本书1～6章内容主要介绍关于量子力学几率诠释的爱因斯坦与玻尔争论问题的研究、波粒二相性进展以及量子力学基础理论在其他方面的发展，例如：波函数的几何相、拓扑相、量子力学与经典力学的界限与宏观水平量子力学等.7～9章论述了腔量子电动力学、量子霍尔效应和玻色-爱因斯坦凝聚等领域的进展.10～12章着重介绍了杨振宁-巴克斯特系统与量子力学的密切关系.

本书的读者对象是物理学工作者，本书对相关专业的研究生和大学本科生从基础理论学习过渡到专题科学研究起引导作用.

图书在版编目(CIP)数据

量子力学的前沿问题/张礼，葛墨林编著. --2版. --北京：清华大学出版社，2012.3
(清华大学学术专著)
ISBN 978-7-302-27792-7

Ⅰ.①量…　Ⅱ.①张…　②葛…　Ⅲ.①量子力学一研究　Ⅳ.①O413.1

中国版本图书馆CIP数据核字(2011)第281658号

责任编辑：陈朝晖
封面设计：傅瑞学
责任校对：王淑云
责任印制：李红英
出版发行：清华大学出版社
　　网　址：http://www.tup.com.cn，http://www.wqbook.com
　　地　址：北京清华大学学研大厦A座　　邮　编：100084
　　社 总 机：010-62770175　　邮　购：010-62786544
　　投稿与读者服务：010-62776969，c-service@tup.tsinghua.edu.cn
　　质 量 反 馈：010-62772015，zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn
印 装 者：三河市春园印刷有限公司
经　销：全国新华书店
开　本：185mm×260mm　　印　张：32.75　　字　数：791千字
版　次：2000年4月第1版　2012年3月第2版　　印　次：2012年3月第1次印刷
印　数：1～1500
定　价：118.00元

产品编号：018889-01

Synopsis

There have been in recent years important progress in the research concerning the probabilistic interpretation of quantum mechanics, especially the dispute between Einstein and Bohr. In order to demonstrate the wave particle duality and the complementarity principle, the "thought experiments" were used in textbooks on quantum mechanics.

These "experiments" actually could not been realized in the physics laboratory. Thanks to break-through developments in the experimental methods in physics many of such experiments have already become reality in the laboratory. The fundamental theory of quantum mechanics has had many developments including the geometrical phase, the topological phase of wave functions, the boundary between quantum and classical mechanics, quantum mechanics on the macroscopic level and so on. Quantum information and quantum computing has evolved into a new rapidly developing field of study. It has strong impact on various branches of physics, especially the quantum mechanical state entanglement and decoherence, quantum measurements and others which serve as its basis, as well as cavity quantum electrodynamics and physics of cold quantum gas (Bose-Einstein condensation) which serve as its possible realization. The extension and depth of research in related directions are being broadened and deepen. We introduce the above mentioned developments in chapter 1～7.

Significant progress in the frontier research of various branches of physics has been achieved by making use of the insights and judgements originating from quantum mechanics. In chapters 8～10 we discuss developments in cavity quantum electrodynamics, quantum Hall effects and the Bose-Einstein condensation.

Yang-Baxter system originated from the many-body problem in quantum mechanics and the eigenvalue problem in statistical models. It has developed into an important direction in mathematical physics. It is a successful theory in treating non-linear problems. In chapters 11～12 we introduce the close connection between Yang-Baxter system and quantum mechanics, attempting to rely upon as much physics intuition as possible.

This book is intended for people working in physics. It provides some guide for graduate students and upper class undergraduates of related disciplines in the transition from course study to active research.

前　言

写这本书的缘起，可以追溯到 1983 年，那一年杨振宁教授在美国石溪纽约州立大学开设了现代物理专题十二讲. 作者葛墨林曾有幸听讲，受到很大启发. 杨先生强调物理学研究课题会涉及不同的分支学科，问题的解决也需要融合各方面的知识. 研究生在学习中应该广泛注意物理学各方面出现的新的概念、进展及其联系.

1986 年杨振宁教授应中国科技大学研究生院邀请，在北京以“相位与近代物理”为题做了 9 次学术报告. 内容涉及近代物理中很多重要概念的萌芽、发展和确立，不仅深刻阐明它们的理论内涵，还介绍了澄清概念的关键实验. 杨先生在每次报告之后，都要和各单位的研究生代表共进工作午餐，进行无拘束的座谈. 在讲座、报告及座谈中杨先生对青年的工作、学习都给予了热情的关心和指导. 他再三强调青年不仅要从事当前的课题研究，关心自己从事的研究方向，而且要关心物理学各方面出现的一些新概念的发展，注意有关期刊上的报道. 作者张礼听了全部讲座，深为杨先生严格精辟的报告和他对青年的关怀所折服. 以后作者二人谈到分别听课的经历，有强烈的共识，决心要在各自的工作中实践杨先生的思想，并且决定合作写一本《量子力学的前沿问题》.

近年来物理学的许多新进展都与量子力学中的一些概念发展有关，可以从量子力学基础理论找到根源. 在这些前沿领域中的进展同时也促进了量子力学理论本身的发展. 在量子力学的几率诠释上存在著名的爱因斯坦与玻尔有关量子力学描述是否完备的争论. 为了解决这个争论，多年来的理论与实验研究已经取得重要进展. 有一些基础问题，例如电子通过双狭缝的干涉问题，从在经典物理学中形成的真观出发，理解是困难的. 在量子力学的教科书中多用“想象中的实验”来解释. 这些实际上不能实现的实验只能教人如何去思考，但却不能很令人信服. 近年来实验方法的惊人发展使得想象变成了现实. 一系列新的实验使得许多概念上的难点得到澄清. 在当前量子力学的研究领域开辟了一个极具挑战性的方向——量子信息学和量子计算. 在这里被处理和传递的信息不再是经典的，它是量子态的叠加. 这是基础科学和重大科技领域密切结合的又一个例子. 近年来量子力学波函数的几何及拓扑相位在许多问题中占据了主要位置. 在量子力学与经典力学界限问题以及介观与宏观体系能体现量子相干性质等方面都有许多进展. 上述的这些进展使人们对量子力学的本质和基础加深了认识，本书第 1～7 章介绍了这些内容.

在物理学的一些前沿领域，研究工作所得到的结果往往需要具有洞察力的分析. 凝聚态物理中分数量子霍尔效应能从二维电子集体态的波函数出发加以解释，从而揭示了新的一种量子流体的存在. 这个例子说明量子力学的应用促进物理学各分支的发展，其成果也扩大了量子力学的用武之地. 本书第 8～10 章选择了腔量子电动力学、量子霍尔效应、玻色-爱因斯坦凝聚等问题展开讨论.

杨振宁-巴克斯特系统是处理多体系统的一大类非线性量子可积模型的普遍理论. 30

年来的进展使它成为数学物理中的一个蓬勃发展的分支.理论物理中不少问题,包括量子力学中最基础的氢原子的对称性、波函数相位的量子化等问题,都和它密切相关.本书第11～12章从这个角度对它做了初步的论述.

量子力学前沿的研究方向和课题是很广泛的,本书仅涉及了其中部分重要内容.本书所讨论的问题以量子力学(包括二次量子化)及统计物理教程的知识为基础.对超出上述知识范围以外的必要理论概念,本书有较系统的介绍.物理学各分支之间有着极为密切的联系,概念、方法往往彼此借鉴、移植.对一个问题的研究也往往涉及多个分支,这一点在本书多个章节中有所反映.为了便于读者阅读有关参考书籍,在有关章节中列出了本书涉及较多的专著或会议文集.

本书读者对象是物理学工作者.在国际上往往通过学术会议、高等进修班或讲座的出版物对一些研究前沿进行较系统的报道.这些书籍或会议记录专业性很强,水平也较高,对初次接触这些内容的工作者,特别是研究生和高年级本科生学习起来会有不少困难.本书希望能帮助他们缩短进入研究工作的过程.

有关量子理论的书,公式推导要占相当篇幅.本书在推导中着重说明推导的目的性、采取的关键步骤以及必要的细节,以期读者不致为太多的"可以证明"或太多的且并不理解的"显然"所苦恼.物理学中重要概念的发展,往往有一个过程,有的过程甚至是很曲折的.许多概念往往在物理学各分支出现,它们具有同一个根源.本书尽量不只用定义引入概念,尽可能从发展和概念的相互关系上做必要的说明.量子力学的创立与初期的发展是建立在实验基础上的.近年来它的一些深刻的基础概念和多年的争论都经过许多高水平的实验所澄清或取得更为深刻的认识.这些实验在人们面前打开一片又一片的新天地.尽管描述实验不是我们的所长,但还是努力介绍其设计构思及采用方法的精妙,并阐明这些实验对深入理解理论、澄清争论问题所起的作用和意义.希望读者能了解到现象后面的物理实质.

本书第1章至第10章由张礼执笔,第11章至第12章由葛墨林执笔.作者二人一起详细讨论了全书的指导思想及章节编排,并共同审定了各章内容.以我们的水平和能力,要想实现本书设定的目标,势必捉襟见肘,会有不少缺陷和错误.诚恳希望各位专家和读者提出批评改进意见.

张　礼
清华大学物理系　清华大学高等研究中心
葛墨林
南开大学数学研究所　清华大学高等研究中心
1999年11月15日

目　录

第1章
波动、粒子二重性，并协原理，Bell定理及有关实验

围绕量子力学的基本原理问题自1925年量子力学创建起一直存在争论. 随着实验工作和理论工作水平的不断提高，一些具体争议解决了，新的问题又提了出来，争论在更高的水平上进行. 在研究前沿上不断出现新的成果.

物质的波动、粒子二重性是量子力学的基础，电子和中子在晶体上的衍射早已为人所知. 1961年C. Jönsson做了电子双缝(以及三缝、四缝)衍射实验. 量子力学教程中为了讲清概念，多用双缝衍射为例说明. 在双缝衍射中涉及的基本概念包括：①电子落在屏幕上，是作为粒子个别落下的. 应该能演示在开始时电子落在屏幕上如夜空随机分布的点点星体，然后逐渐显出干涉条纹的极大和极小. 条纹极大代表落在该处电子数目最多，而这个几率分布是由波函数确定的. ②Dirac在他的《量子力学原理》中指出，电子是自己和自己干涉. 一定要允许它(即一个电子)从两个缝通过才会有干涉发生. 在实验上要演示这一点，要创造条件，在任何时间只能有一个电子处于狭缝与屏幕之间. 在20世纪80年代末期以前要达到观察干涉条纹的积累过程以及保证在仪器中只能存在一个电子的条件是困难的. 本章1.1节介绍殿村(A. Tonomura)在1989年所做的满足了以上要求的实验.

光的双缝实验是19世纪初Thomas Young首创的. 从光的波动性讲，理解是很直接的. 但如果从二重性的观点把光也看成光子时，理解的困难和上面讨论到的电子双缝实验一样，即一个粒子如何同时通过两个狭缝. 更有甚者，常用的光源，包括激光器在内，都属"经典光源"，无法保证在一个光子通过仪器时没有第二个光子存在，不论光源是多么弱. 本章1.4节介绍的单光子干涉实验(1986年，Aspect)是企图解决与经典光源相联系的困难的.

近年来出现的"多光子干涉学"，实际上是演示一对关联的光子自己和自己的干涉现象，并且体现了单光子干涉与双光子干涉现象不能并存，这些都加深对量子力学的理解. 本章1.5节将对此作出介绍.

处于量子力学原理的争论核心的还是并协原理. 它包括若干相互联系的问题. 电子通过双缝能发生干涉，因为给它提供了两条路径的选择可能，这样它才会显示波动性. 如仍开放两条缝，但用光把缝照亮，使电子通过时能够"看见"它从哪一个缝通过——使它显出粒子性，这时条纹便会消失. 这是量子力学的并协原理预言的，果真如此吗？这在书上被称为"想象中的实验"，意思是实际上是没法做的实验. 困难在于，光和电子相互作用太弱. 即使用光照亮狭缝，电子通过缝时虽绝大多数是通过了，却未被发现. 现在，"想象"已变成了现实. 如

果用原子代替电子，而用以照它的是调谐好的共振光，这样相互作用足够强以至原子难以漏网（1995年，Pritchard），便可以证实量子力学的预言．用光驻波作为衍射栅进行的原子干涉仪实验（1998年，Rempe等人）也明确对此给予验证．我们在1.2节介绍这些发展．

另一个有关的问题是：电子显示的波动性为什么在用光照它时会遭到破坏？过去的标准解释往往是，如果要观测它，例如用光照一下，光子在它上面散射时会改变它的动量．这类相互作用是无法控制的，因为光散射是概率过程，且给它的动量也是有一个分布的．在一些情况下，这会是主要原因，但不同情况也会有不同机制．例如在1.2节中Pritchard实验中，造成干涉损失的原因是光子散射造成的有效相移，这个有效相移是可以用实验控制的．有效相移加大，干涉条纹对比度减小．Rempe实验表明，路径与原子的可观察性质（在此情况下是原子的内部状态）的缠绕是干涉丧失的原因．传统的解释源于对Heisenberg不确定性原理的物理分析．其标准译法是“测不准原理”．是不是不测就可以准呢？本章1.6节将介绍的量子光学中微脉泽实验就避免了这种“不可控制的相互作用”，而是通过电子与光子自由度的关联（缠绕）而导致相干丧失；同样，如果抹去这个关联，相干就会恢复．本章的1.6节量子涂消器介绍这个内容．

Feynman说过：“只有在一个装置中无法在物理上互相区分的状态才能干涉．”邹兴宇、王力军和Mandel实验表明，只要实验不提供区分的可能性，便有干涉，但如实验提供可能，甚至不必放探测器去实测，干涉就消失了（请见本章1.5.4节）．

有一种说法，量子客体如何表现（例如表现波动性或粒子性）关键在于它如何“感知”测量装置的情况．你用一种方法，它根据关于装置的信息决定呈现波动性或粒子性．1978年J. A. Wheeler提出一个妙法，叫“推迟选择实验”，大意是：先设定好条件，等客体已经通过了设备（即表现已经确定），在探测它之前，再突然改变条件，看结果如何．本章中不止一个实验涉及推迟选择，如1.9节中所述．当然，客体的行为只和最终的实验条件有关，它不会根据信息预作准备．

在所有的争论中，显然最著名的是A. Einstein和N. Bobr的争论，或称Einstein-Podolsky-Rosen（EPR）佯谬．对于量子力学对微观客体性质做出的实验预言，早已没有什么异议，量子力学已经在科学和工程中大量、广泛地应用，并且很成功．Einstein的挑战是，量子力学的描述是不完备的，意即客体的性质比量子力学能描述得要多．多年来许多研究人员打算去挖掘这种潜藏的可能．有的失败于不能自洽，但有的好像言之不无道理．这后面一类理论的一个共同名称叫“隐变量”理论，也有的叫“定域实在性”理论，争辩起来十分困难．1965年J. S. Bell提出了一个定理：定域实在性理论如果要和量子力学做出同样预言，它就必然要满足一个不等式．这就为争论提供了一个极明晰的判据．从20世纪60年代后期起一大批实验投入了不等式的验证．结果愈来愈精确地验证了不等式被破坏．从那时起过了30多年，争论都没有停止．原因是任何一个实验几乎不可能没有“漏洞”，于是便有人提出异议．近代物理学的实验方法的确使人叹服，目前已能使Bell不等式的破坏超过了100个标准偏差．这还不算完结，最近又出现了不涉及不等式的Bell定理，用实验直接反驳“定域实在性”理论．这些将在本章1.7～1.10节讨论．

1.1　电子干涉图像的累积

在量子力学教科书中常用电子双缝实验说明电子的波动性．在实验中电子通过狭缝落在屏幕上，逐个被探测器记录，星星点点地积累起来的电子逐渐形成干涉图像，干涉图像是

因为通过两个狭缝的波 ψ_1 和 ψ_2 叠加而形成的，在屏幕上的强度和 $|\psi_1+\psi_2|^2$ 成正比. 形成干涉图像的条件是电子的 de Broglie 波长要大于双缝距离，波的相干长度要大于两条干涉路径的程差，并且不对电子通过哪一个狭缝进行测量. 如进行这类测量(例如在一个狭缝附近放置光源或使狭缝平面自由悬挂)，则在屏幕上记录的只是电子通过两个单狭缝图像的和，即 $|\psi_1|^2+|\psi_2|^2$. Feynman[1] 指出："这是绝对不能用任何经典方式解释的. 在其中包含了量子力学的核心.""实际上它包含了唯一的奥秘."他还指出："这个实验尚没有实际进行过，因为仪器的尺度需做得不能实现地小."原因是电子束能量必须足够单一，而满足要求的电子束能量就显得太大，其 de Broglie 波长就比双缝的尺度小得太多. 这类实验被称为"想象中的实验"①，书中的实验是为了说明(而非证实)量子力学的基本原理.

A. Zeilinger[2] 等人实现了中子干涉图像的积累形成. 他们采用相当于速度为 200m/s 的极冷中子，波长为 2nm. 宽度为 22μm 和 23μm 的两个狭缝，间距为 104μm. 探测平面在狭缝平面下游 5m 处. 所得干涉图样示于图 1.1. 衍射实线代表理论预言(已经考虑了仪器的具体条件). 此外，观测到的中子强度低到平均 2s 1 个计数. 实验演示了显出波动性的干涉图样实际上是由中子一个接一个落于观测平面上而形成的，而且在中子单独通过仪器时是自己和自己干涉.

为了克服 Feynman 提到的实验观测的困难，殿村等人[3] 用配置了电子双棱镜的电子显微镜和位置灵敏电子探测系统实现了电子干涉图像的积累. 电子双棱镜的工作原理如图 1.2 所示，双棱镜由两个平行接地的平板电极以及一个半径为 a 的细丝组成，细丝与平板距离为 b，细丝处于正电势. 静电场的势为 $V(x,z)$，入射波为 $e^{ik_z z}$. 在有电磁场(其 4 维势为 A_μ)存在时的波函数 ψ 和没有电磁场的波函数 ψ_0 的关系是②

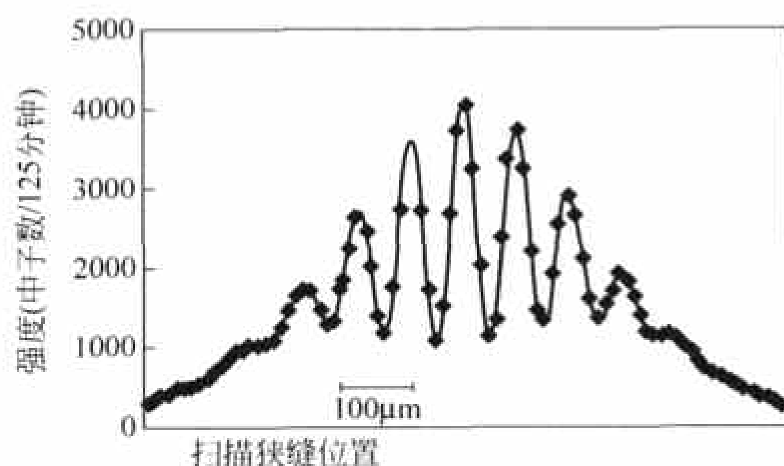


图 1.1 极冷中子的双缝衍射图样

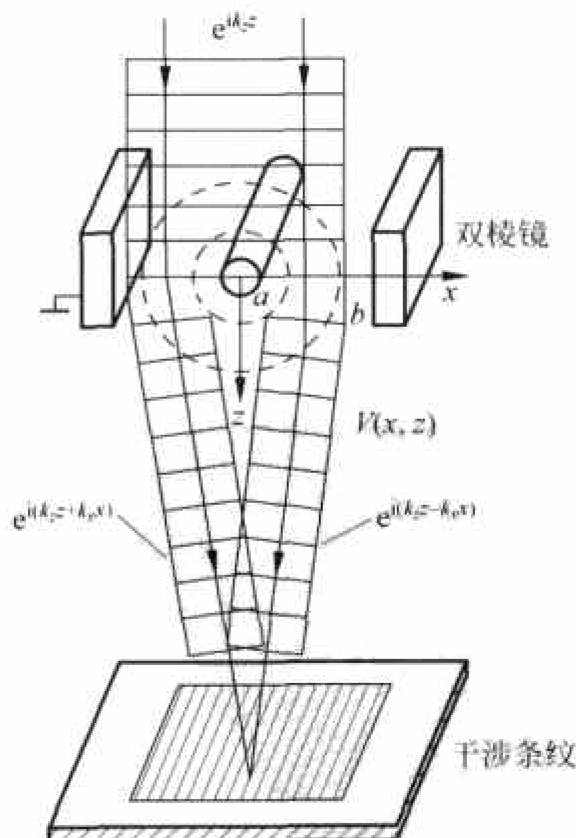


图 1.2 电子平面波通过双棱镜产生干涉条纹

① thought experiment，多译为理想实验. 更确切地应译为想象中的实验，因为它们曾被认为是不可能实现的.

② 请参阅本书第 3 章 3.1 节.

$$\psi(\xi)=\exp\left(-\frac{ie}{\hbar}\int^{\xi}A_{\mu}(\eta)\mathrm{d}\eta^{\mu}\right)\psi_0(\xi). \tag{1.1.1}$$

指数上的积分是从任一参考点积至 ξ,ξ 与 η 均为4维时空坐标.4维势在此处只有标量分量 $A_0=V(x,z)$,而势 $V(x,z)$ 对坐标 x 是对称的,因此积分为

$$\int V(x,z)\mathrm{d}t=\int V(x,z)\frac{\mathrm{d}s}{v_z}=\frac{m}{\hbar k_z}\int V(x,z)\mathrm{d}s,$$

此处 $v_z=\frac{\hbar k_z}{m}$ 是电子的速度,ds 为线元.取参考点为 $z=-\infty$,式(1.1.1)中的相因子为

$$\exp\left(-\frac{iem}{\hbar^2 k_z}\int_{-\infty}^{z}V(x,z')\mathrm{d}z'\right).$$

进入双棱镜的电子波函数为

$$\psi(x,z)=\exp\mathrm{i}\left(k_z z-\frac{em}{\hbar^2 k_z}\int_{-\infty}^{z}V(x,z')\mathrm{d}z'\right). \tag{1.1.2}$$

电子在通过时受力基本是在 x 方向,其大小为 $-e\frac{\partial V}{\partial x}$.将 V 在 $x=a$ 附近展开($x\geqslant a$)得

$$V(x,z')=V(a,z')+\left.\frac{\partial V(x,z')}{\partial x}\right|_{x=a}x,$$

对于 $x\leqslant -a$,有 $\frac{\partial V(-x,z')}{\partial x}=-\frac{\partial V(x,z')}{\partial x}$.对 $x\geqslant a$,通过双棱镜的电子波函数是

$$\psi(x,z)=\exp\mathrm{i}\left(k_z z-\frac{em}{\hbar^2 k_z}\int_{-\infty}^{z}V(a,z')\mathrm{d}z'-x\frac{em}{\hbar^2 k_z}\int\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{x=a}\mathrm{d}z'\right),$$

括弧中第二项与 x 无关,归结为只与 z 有关的相因子.电子通过后,获得在 x 方向的动量是(记它为 $-\hbar k_x$)

$$\int\mathrm{d}t\left(-e\frac{\partial V}{\partial x}\right)=\int\mathrm{d}z'\frac{m}{\hbar k_z}\left(e\frac{\partial V}{\partial x}\right)=-\hbar k_x,$$

故 $\psi(x,z)$ 右方括弧中第三项实际上是 $-k_x x$.最后得到

$$\psi(x,z)=\exp\mathrm{i}\left(k_z z\mp k_x x+\phi(z)\right), \tag{1.1.3}$$

符号"$-$"适用于 $x>a$,符号"$+$"适用于 $x<-a$.两束波会聚后总的波函数为

$$\psi(x,z)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_z z+\phi(z))}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_x x}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x x}).$$

干涉图像由下式给出

$$|\psi(x,z)|^2=4\cos^2 k_x x. \tag{1.1.4}$$

对圆柱状细丝,在它附近的静电势为

$$V(x,z)=V_a\frac{\ln(\sqrt{x^2+z^2}/b)}{\ln(a/b)},$$

此处 V_a 为丝上的电势.从 k_x 的定义式可得

$$k_x=\frac{\pi eV_a}{\hbar v_z}\ln\frac{b}{a}. \tag{1.1.5}$$

从实验装置的参数所决定的干涉条纹距离 $d=\frac{\pi}{k_x}$ 很小,不能直接观察.用电子光学的技术,可以在电子显微镜的像平面之后再加两个投影透镜将条纹距离7 000Å(1Å$=10^{-10}$m)放大2 000倍,达到1.4mm,再采用位置灵敏的电子记录技术.电子在屏幕上的累积过程示于图1.3.实验中电子到达探测平面的数目约为10^3个/s,从电子源(场发射尖端)到屏幕的距

离是 1.5m，电子速度是 1.5×10^{8} m/s. 如电子是均匀发射的，则两个电子间的平均距离是 150km，电子波包的长度只有 1μm. 因此同时有两个电子位于棱镜区域的几率极小，波包重叠的可能极小. 实验记录 20min 就可以出现干涉条纹，最初电子像是无规则地出现在探测平面各处，在电子总数达到 3 000 时初步呈现出条纹的图像，最后电子总数达到 70 000 时清晰可见 5 个条纹.

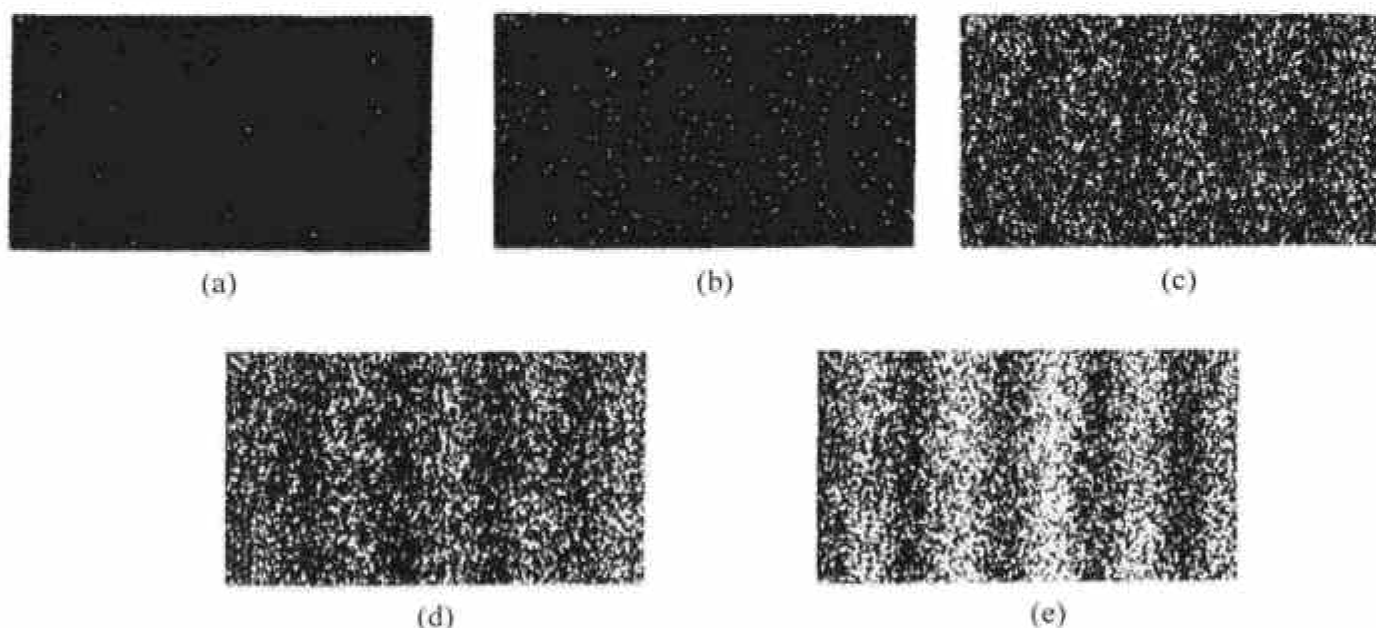


图 1.3 电子在屏幕上累积. 取自[3]，由殿村教授提供

这个实验清楚地显示了电子的波-粒二重性. 单个电子通过双缝的波产生干涉条纹，而在探测器中电子是作为定域的粒子记录的，它在探测平面某位置上出现的几率由式(1.1.4)确定.

Feynman 进一步分析，如果用光照一下某一个狭缝以便判定电子是否从这个狭缝通过，则干涉条纹就不会产生.

定性地可以理解如下：在狭缝平面下游电子波函数为

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a+\psi_b).$$

此处 ψ_a 和 ψ_b 分别代表通过狭缝 a 和狭缝 b 的波. 衍射图样决定于 ψ_a 和 ψ_b 在屏幕上不同点处的相位差. 探测电子通过情况的光子在两波之一上散射，否则就得不到电子通过的信息. 散射会改变 ψ_a 或 ψ_b 的相位，而改变是几率性的. 因此，衍射图样会被抹匀，可见度降低甚至消失.

这个实验的“想象”程度很高，实际上能实现吗？在下一节中将报道实验物理学家是如何使它成为现实的.

1.2 并协原理的原子干涉仪验证

双缝实验提供的关于微观世界的认识是和经典物理的图画完全不同的. 如果要干涉条纹(波动性质显露)，那么就不可能确定电子通过的是哪个狭缝. 如果要判断它通过了哪个狭缝(提供有关路径的信息，即粒子性质显露)，干涉条纹就消失. 这个认识由 N. Bohr 在 1927 年总结为并协原理(互补原理). 一个粒子的位置描述和动量描述可以看作是量子状态的互补描述. 在量子力学中不能像在经典力学中那样同时用这两个力学量给出运动轨迹. Dirac

对这个新的观点表征为“导致物理学家的世界观急剧的变化，也许是迄今发生的最大的变化”. N. Bohr不倦地通过各种演讲、会议、文章阐明这个原理是微观世界的现实. 这个努力遇到很大的困难. 开始时反对者众多，其中最具权威的是A. Einstein（参阅本章1.7节）. 可见如能直接在实验上演示它的正确性，意义是十分重大的. 用电子或中子干涉仪实现Feynman这个想象中的实验，困难在于电子及中子和光的相互作用都很弱. D. Pritchard领导的研究组在MIT用原子干涉仪实现了这个实验[4]. 他们用共振光照射干涉仪中的原子，正像Feynman指出的那样，如果光子的散射能提供散射它的原子在干涉仪中走的“哪一条路径”①的信息，原子的波动性质即被毁灭，而表现为粒子. 但若由光子散射所引起的两条原子的路径程差小于光的波长的一半，因而散射的光子不能提供散射原子的路径，波动性质就能保留. 这个研究组进一步辨明了，如果只探测散射方向在一定窄范围内的光子，失去的干涉图像还能恢复，代价是这些散射光子并不能提供散射原子走的“哪一条路径”的信息. 实验结果明确地说明，并不是光子散射带来的干扰本身毁灭了波动性. 光子散射是否毁灭波动性，在于它是否提供原子走“哪一条路径”的信息. 相干的损失根源不在于光子所传递的动量，而在于随机的相移. 这点将在下面详细讨论，这是并协原理十分直接的演示.

由超声惰性气体流载带的钠原子（速度均匀度达均方根误差$<4\%$）被σ^+偏振的激光泵浦到$F=2, m_F=2$态上. 用Stern-Gerlach分析磁体证实，泵浦率达95%. 原子束经两个狭缝准直，进入由三个光栅（纳米工艺制造）组成的Mach-Zender干涉仪. 图1.4中垂直点线代表光栅，L为相邻光栅距离. 原子在干涉仪中$z=0$处的分束、$z=2L$处的复合以及在$z=2L$处的反射是通过在光栅上的透射和Bragg反射实现的，原子束以Bragg角入射在第一光栅上. 干涉条纹由$\overline{N}[1+C\cos(k_g x)]$给出. 此处$k_g=2\pi/\lambda_g$，$\lambda_g$是光栅的周期；$\overline{N}$是平均计数率；$C$称为干涉图像的对比度，也称可见度（visibility）. 图1.5是实验的示意图. 用σ^+偏振光（光子动量$\boldsymbol{k}_i$）将原子共振激发到$F'=3, m'_F=3$的状态. 共振激发保证原子与光的强相互作用是实现这个“想象中实验”的保证. 原子经自发辐射动量为$\boldsymbol{k}_f$的光子退激回基态. 未经激光激发的原子在干涉仪中的路径由虚线（平行四边形）表示，原子在散射光子后的路径由实线表示. $\boldsymbol{d}$代表在光子散射处干涉仪两臂间的距离. 实验中干涉条纹对比度的损失将用$\boldsymbol{d}$的函数衡量.

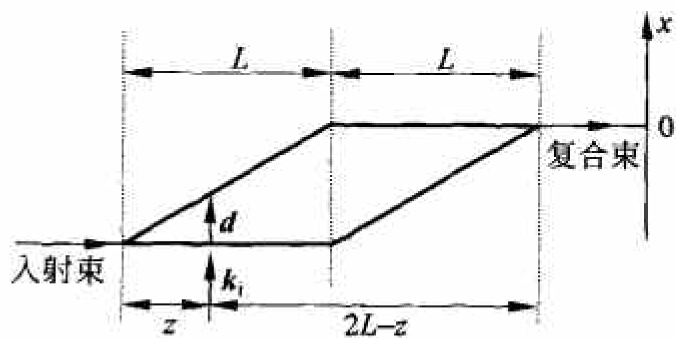


图1.4　Mach-Zender干涉仪中原子的路径

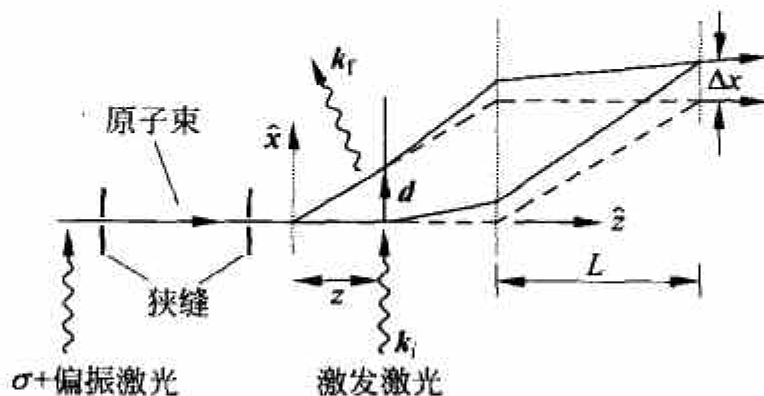


图1.5　光子散射对原子干涉的影响

令λ_g为光栅周期. 在白干涉条纹几何（white interference fringe geometry）条件下，复合光栅起条纹的掩膜作用. 没有光子散射时在复合光栅处的原子波函数是

① 英文which path或德文welcher Weg已成了描述这类实验的专用名词.

$$\psi(x) \propto u_1(x) + u_2(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_g x},$$

此处 u_1 和 u_2 是上束和下束的振幅(均为实数)，$k_g=\frac{2\pi}{\lambda_g}$. 光子散射造成的影响如下：

① 光子动量变化为 $\Delta \boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_f-\boldsymbol{k}_i$，它的 x 分量记为 Δk_x. 原子在散射光子后在 x 方向的动量变化的数值也是 Δk_x. 因此干涉图像的包络线在 x 方向的移动是 $\Delta x=\frac{\Delta k_x}{k_A}(2L-z)$，此处 k_A 是原子的动量，它和原子的 de Broglie 波长 λ_A 的关系是 $k_A=\frac{2\pi}{\lambda_A}$.

② 沿干涉仪两臂的原子波相对相移变化 $\Delta\phi=\Delta \boldsymbol{k}\cdot \boldsymbol{d}=\Delta k_x d$. 重要的是，光子散射是量子过程，因此 $\Delta \boldsymbol{k}$ 是有几率分布的. 综合这两项影响后复合光栅处原子波函数改为

$$\psi'(x,\Delta k_x) \propto u_1(x-\Delta x) + u_2(x-\Delta x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_g x+\Delta\phi)}. \tag{1.2.1}$$

如果观测所有的原子，即不考虑散射光子动量 $\boldsymbol{k}_f$ 的方向，则结果的干涉条纹应是相应不同相移 Δk_x 的干涉条纹的非相干叠加：

$$C'\cos(k_g x+\phi') = \int \mathrm{d}(\Delta k_x)P(\Delta k_x)C\cos(k_g x+\Delta k_x d), \tag{1.2.2}$$

此处 $P(\Delta k_x)$是横向动量传输的几率分布，它由偶极辐射分布给出，示于图 1.6 的右上方. 动量传输为 0 相当于向前散射，为 $2\hbar k$ 时相当于向后散射. 动量传输平均值是$\hbar\overline{\Delta k_x}=\hbar k$. C 是无激光照射时干涉条纹的对比度. 式(1.2.2)表明干涉图像对比度 C' 以及相角 ϕ' 作为 d 的函数是动量传输分布函数 $P(\Delta k)$的 Fourier 变换的大小及辐角. 利用实验结果将使用激光时测得的条纹对比度 C' 与不用激光时的对比度 C 之比(称为相对对比度)以及相移作为 d 的函数绘于图 1.6. 在实验中共振激发激光束沿 z 轴方向移动(见图 1.5)给出不同的 d 值：$d=z\frac{\lambda_A}{\lambda_g}$. 若 $d<0$，相当于 $z<0$，即激光束位于第一光栅之前. 从结果可以看到，$d<0$ 或 $d>0$ 但很小时，光子散射对原子干涉的对比度和相位没有影响. 对$\overline{\Delta k_x}d\ll\pi$，相移随 d 线性增长.

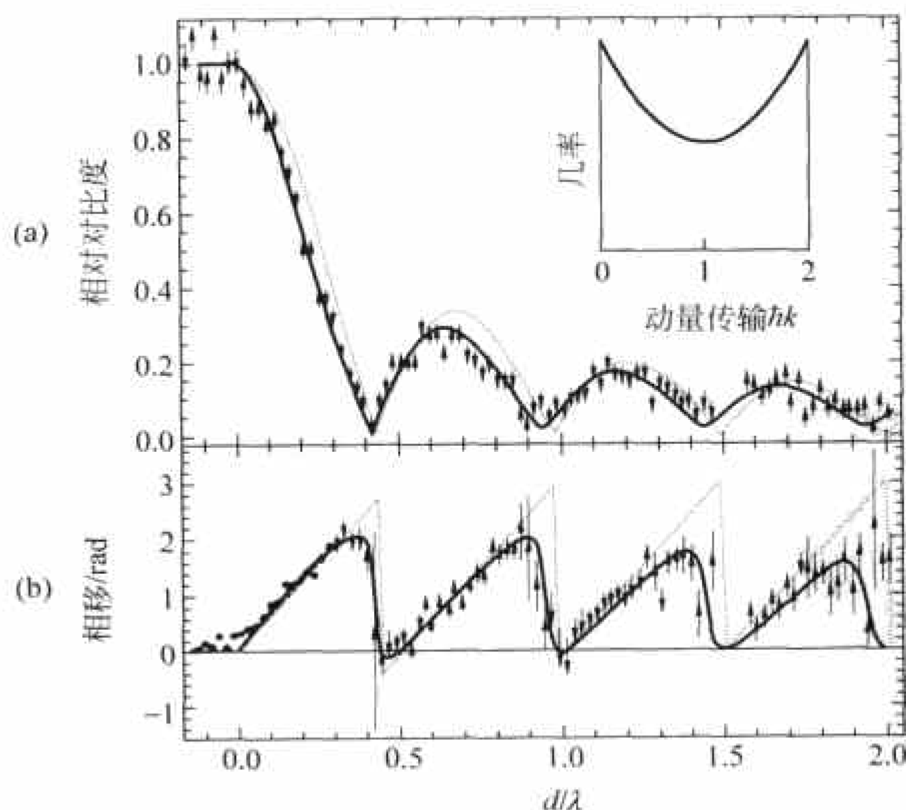


图 1.6 相对对比度及相移作为 d 的函数(λ 是激光波长)

对各向同性散射$\overline{\Delta k_x}=k=\frac{2\pi}{\lambda}$（$\lambda$ 是激发激光的波长），$\overline{\Delta k_x}d=2\pi\frac{d}{\lambda}$，即平均相角随 d/λ 线性增长，斜率为 2π. 相应地，相对对比度迅速下降. 图中虚曲线对应单光子散射的理论计算，实曲线为对实验点的最佳拟合. 此处考虑了有 5% 原子没有吸收光子（未被泵浦激光带到 $F=2, m_F=2$ 态），另有 18% 原子吸收两个光子的实际情况. 对比度随 d 增加而急剧下降，到 $\overline{\Delta k_x}d\approx\pi$ 即 $d\approx\lambda/2$ 时降至 0. d 再行增加时相角从 0 开始，此时对比度部分恢复，然后再随相角增加而减少. 这种趋势周期性重复.

有了以上结果，就可以讨论一个重要问题：相干损失（或称去相干 decoherence）的原因是什么，或把问题提得普遍些，是什么机制使得并协原理成立. 在经常讨论的例子中，例如 Einstein 提出的自由悬挂的双缝平面，或 Feynman 提出的用光照狭缝，最终都是 Heisenberg 的动量-位置不确定关系破坏了相干条件. 在这个实验中，很自然地想到光子给予原子的动量传输. 由于它引起干涉条纹在 x 方向移动以致最终把明暗抹平. 在本实验中干涉条纹包络线的移动 Δx 正是代表这个效应（Δx 与 Δk_x 成正比）. 实验的实际数值 Δx 相当 100～200 个条纹，它的变化很难说明条纹对比度的变化. 相移 $\Delta\phi$ 最多只相当几个条纹. 实际上，当激光束位置向小的 z 值变化时，对给定的 $\boldsymbol{k}_f$，Δx 有所增加，而同时当 $z\to 0$ 时，相干损失和相移同步减小而趋于 0. 因此光子散射造成的有效相移是和对比度损失直接关联的.

在以上描述的实验中，调整第三个光栅（复合处的光栅）位置及宽度，就能探测从光子接受了不同动量传输的原子，并把它们与光子的散射方向联系起来. 实验结果示于图 1.7，图中 Ⅰ 代表基本上是光子向前散射，Ⅱ 相当中间散射角，而 Ⅲ 基本是向后散射. 探测器接收的 Δk_x 分布的 $P_i(\Delta k_x)$（$i=$ Ⅰ，Ⅱ，Ⅲ）示于图 1.7 下图的右上方，虚线是各种 Δk_x 全部接收的分布. 图 1.7 上图是相对对比度，下图是相移. 实线是根据实验具体几何条件计算的结果，虚线是对全部原子（不对 Δk_x 加以限制）都探测的计算曲线. 上图中 Ⅱ 的结果和 Ⅰ 差别不大，未在图中画出. Ⅰ，Ⅱ，Ⅲ 限定的动量传输范围是和相移曲线的斜率相应的，分别是接近于 0，3π 和 4π. 从上图看出对比度的下降比测量全部原子时要慢得多了. 实际上当 $d\approx\lambda/2$ 时对比度还只降到约 60%.

这个结果显示出，测量和光子散射无关联和有关联的原子结果会如此不同. 而光散射的条件和结果本来是一样的. 被原子散射的光子可以有很多的终态 $\boldsymbol{k}_f$，而原子也有很多与 $\boldsymbol{k}_f$ 一一对应的状态. 散射后的原子-辐射场体系实际是以 Schrödinger 缠绕态[①]表示的. 原子-辐射场体系没有耗散，是按照 Schrödinger 方程演化的. 原子的相干本来没有被消灭，只是被缠绕在为数众多的末态库中了. 众多末态按一定几率分布，相移因之也按几率分布，总的效果就把干涉条纹抹平了. 一旦大大限制末态的数量，相干就会在一定程度上恢复. 当然可以问，这个实验直接提供了走"哪一条路径"的信息了吗？原则上，测量散射光子的 $\boldsymbol{k}_f$ 可以提供相应原子的路径，在这个实验中并没有实际去测. 因此，只要实验装置的安排（起决定性的是光子在原子上的散射）提供走"哪一条路径"信息的可能性，将粒子性推到前台，波动性

① 设有两个体系 A 和 F（例如原子与辐射场），发生相互作用以后总体系的状态用 $\sum_i A_i F_i$ 表示，而不能简单地用一个乘积 AF 表示，这个线性组合被 Schrödinger 称为"缠绕态"（entangled state），他说："缠绕不仅是量子力学的特征之一，而且它就是唯一的特征."

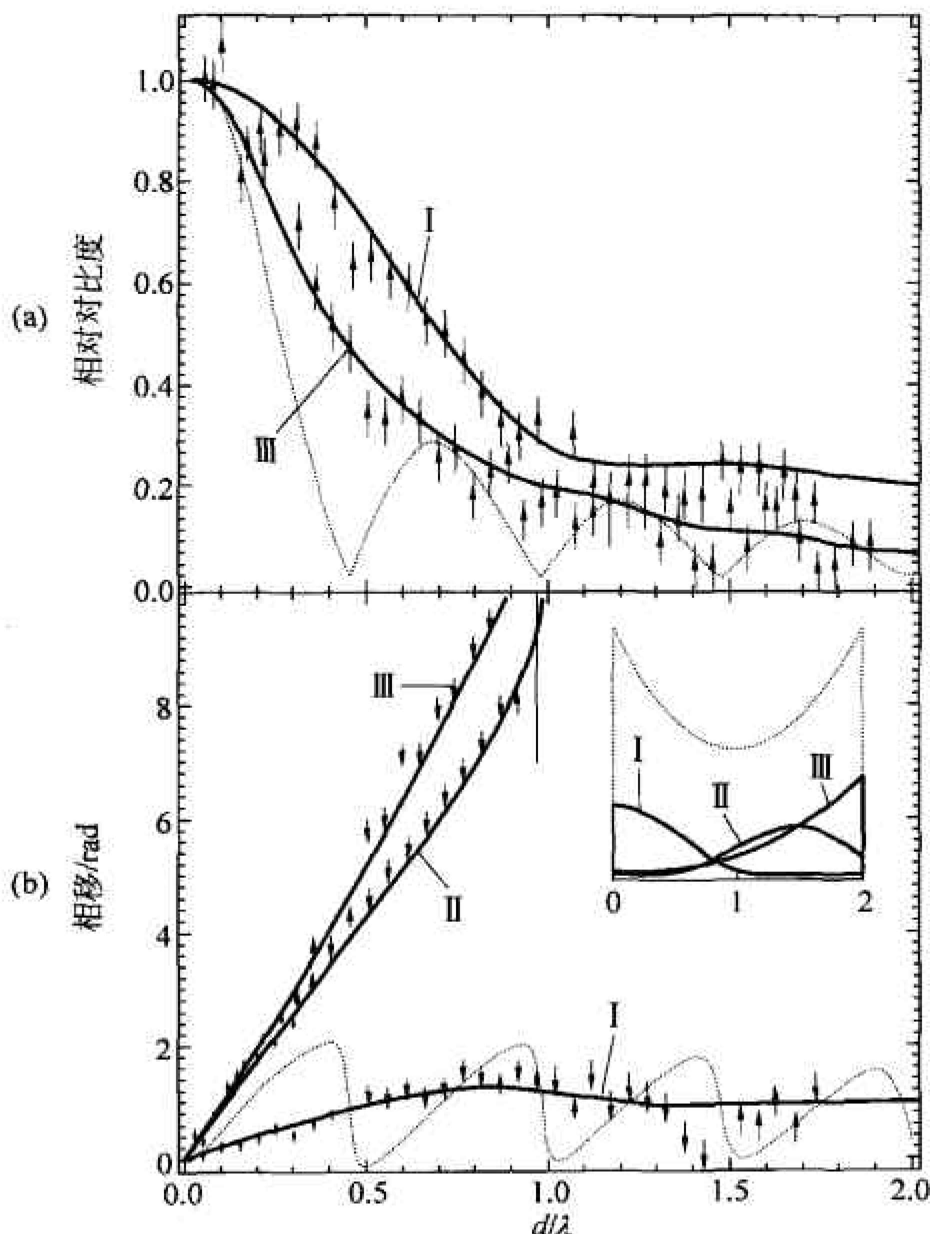


图 1.7 探测与一定散射方向光子相关联的原子时干涉的相对对比度与相移

就退隐了. 关于这一点,此后的一个原子干涉仪实验[5]给予了进一步的阐明. 这是用^{85}Rb 原子束作的"双狭缝"实验,只不过衍射栅是由光的驻波所构成. 光频率 ω_0 相对于原子激发态与基态能级差 ΔE 有一定的失谐 Δ,$\Delta=\omega_0-\frac{\Delta E}{\hbar}$. 驻波波节与波腹处光的强度 I 不同,从而对原子产生"光移势"(light shift potential)U,$U\propto\frac{I}{\Delta}$[6]. 在原子入射角度为 Bragg 角时,这个周期势使原子发生 Bragg 反射[7]. 在图 1.8 中原子束 A 以 Bragg 角入射,光驻波将它分为透射束 C 与 Bragg 反射束 B,调整光的强度可以使驻波成为反射率为 50%的分束器. 经自由传播时间 t_s,两束到达第二个驻波时已经分开距离 d,它相当双缝的距离. 通过第二个驻波时束 B 分为 D(透射)及 F(反射),束 C 分为 G(透射)及 E(反射). 同方向的原子束在远场发生干涉形成干涉条纹. 由于入射束与分束器并不垂直,故干涉条纹在左右包络线下并不对称,左峰下的极大对应右峰下的极小. 条纹间的距离决定于原子与

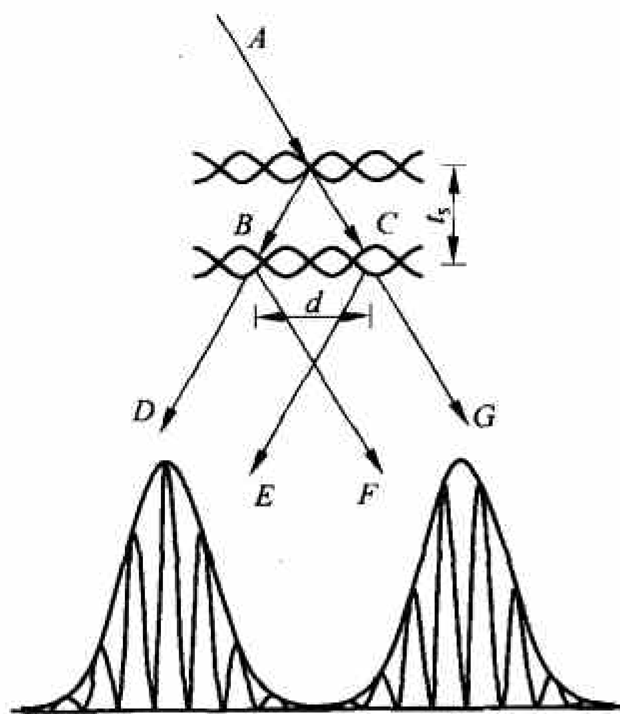


图 1.8 原子干涉仪示意图

驻波相互作用时间长短(可以用光源的开与关控制)，理论值与实验结果符合.

有关"哪一条路径"的信息可以储存在原子的内部状态中. 如图1.9所示，^{85}Rb原子激发态$5^2P_{3/2}$以$|e\rangle$代表，基态$5^2S_{1/2}$有两个超精细态，自旋分别为$F=2$与$F=3$，分别用$|2\rangle$与$|3\rangle$代表. 光驻波频率ω_0调在$|2\rangle\to|e\rangle$与$|3\rangle\to|e\rangle$跃迁之间，即$|2\rangle$与$|e\rangle$跃迁失谐参数为负，$\Delta_{2e}<0$，而$|3\rangle$与$|e\rangle$跃迁失谐参数为正，$\Delta_{3e}>0$，且$\Delta_{3e}=-\Delta_{2e}$，设入射原子处于$|2\rangle$态，在它到达第一个分束器以前先经过微波场，其频率ω_{mw}等于$|2\rangle$与$|3\rangle$能量差(除以$\hbar$). 脉冲长短调节到使$|2\rangle$与$|3\rangle$混合为①$|3\rangle+|2\rangle$. 当这束原子遇到第一个分束器时，透射束没有相移，而在Bragg反射束中，作用于$|2\rangle$的光移势为负，相当于在光密介质上的反射，将有相移π；作用于$|3\rangle$的光移势为正，没有相移. 因此，透射束为$|3\rangle+|2\rangle$，反射束为$|3\rangle-|2\rangle$. 在分束器之后两束分离. 再经过一个频率与脉冲长短都与前一个相同的微波场，透射束变为$|3\rangle$，而反射束变为$|2\rangle$. 这样，走"哪一条路径"的信息便被巧妙地储存在原子内部状态中了. 这两束再经过第二个分束器到达探测器平面时，就看不到干涉条纹了(图1.10). 这时在探测器平面上对$|2\rangle$与$|3\rangle$是一律探测而不加区别的，即实际上并没有去测量"哪一条路径"的信息. 但只要这种信息有被获取的潜在可能性，干涉条纹就不再出现. 当然，如果探测器区分$|2\rangle$与$|3\rangle$，计数率曲线形状仍与图1.10所示的相同，只是大小减半而已. 干涉消失的原因是内部自由度与原子质心运动的缠绕. 通过第二个分束器后的波函数是(见图1.8及图1.9)

$$|\psi\rangle\propto-|\psi_D\rangle\otimes|2\rangle+|\psi_E\rangle\otimes|3\rangle+|\psi_F\rangle\otimes|2\rangle+|\psi_G\rangle\otimes|3\rangle.$$

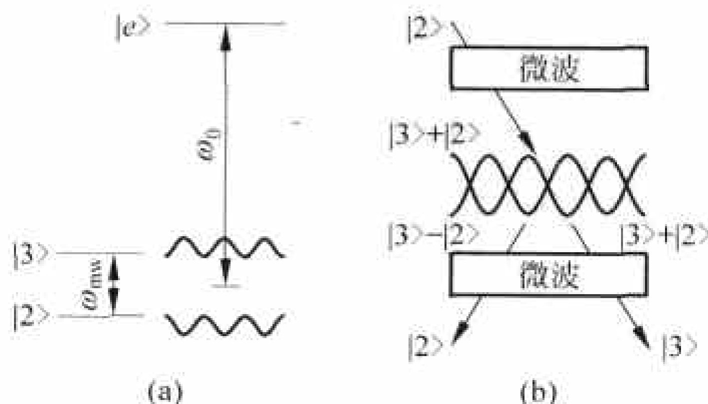


图1.9　路径信息存储于原子内部状态

(a) ^{85}Rb原子简化能级；(b) 用两个$\pi/2$脉冲微波改变原子内部状态

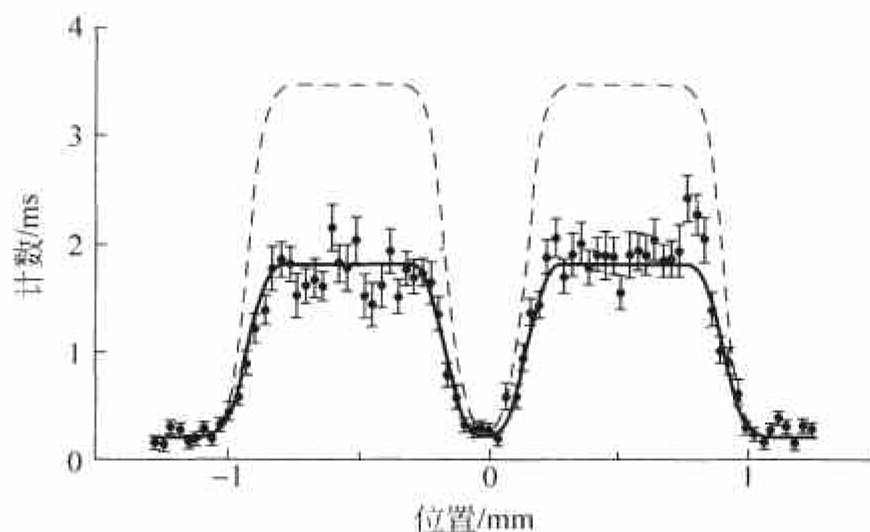


图1.10　路径信息存储于原子内部状态后在包络线下干涉条纹消失

① 略去归一化因子，本小节以下推导中同此. 关于两能级由共振电磁场所混合问题，请参阅本书8.2节.

$|2\rangle$在 Bragg 反射时相移 π(相因子 $e^{i\pi}=-1$)给出负号. 与$|\psi_D\rangle$直积的$|2\rangle$反射一次给出负号,而与$|\psi_F\rangle$直积的$|2\rangle$因反射两次给出正号. 在远场处左方包络线下(此处 ψ_F,ψ_G 为 0)的原子位置(坐标 z)分布是

$$P_L(z)\propto|\psi_D(z)|^2+|\psi_E(z)|^2-\psi_{D^*}(z)\psi_E(z)\langle 2|3\rangle-\psi_{E^*}(z)\psi_D(z)\langle 3|2\rangle.$$

上式右侧第三、四项是干涉项,但由于$|2\rangle$与$|3\rangle$正交,它们都为 0 而使干涉条纹消失. 有趣的是,在准备有关路径的信息时,微波场会给原子以干扰,造成它动量的变化 Δp_z,但计算表明[5],在探测器平面上它造成原子位置的移动是 $\Delta z=\pm 10\mathrm{nm}$. 和条纹位置图上的尺度 mm 相比,这是观察不到的. 干涉粒子与探测器的关联(缠绕)在任何"哪一条路径"实验中都会出现. 在 Feynman 双缝衍射中用光显微镜观察粒子或 Einstein 的悬挂反冲狭缝的例子中,这些缠绕本来都是存在的. 但由于测量路径所带来的动量不确定性正好能说明干涉条纹的消失,在教科书中便把它作为唯一的原因,而把态的缠绕推到后面去了. 通过 Pritchard 研究组的实验和上面的分析,动量不确定性都不能说明条纹消失,就凸显了状态缠绕为其根本原因.

1.3 并协原理的量子光学验证

上一节提到,在 Einstein 和 Feynman 想象中的实验里,都是由于 Heisenberg 动量-位置不确定关系破坏了相干,从而使并协原理成立. M. O. Scully, B-G. Englert 和 H. Walther[8] 则想出一个绕过这个不确定关系的办法来判断走"哪一条路径". 他们的想法基于量子光学微脉泽(micromaser)①技术的新进展. 一个处于长寿命激发态的原子在通过高品质的微脉泽腔时,会发射光子而退激到更低的状态上. 这种利用腔的条件大大提高发射几率的现象是"腔量子电动力学"②的研究内容. 建议的实验装置如图 1.11 所示. 用激光将 Rb 原子共振激发到长寿命 Rydberg 态 $63p_{3/2}$. 如果不放置微脉泽腔而让原子通过双缝,在双缝后面原子的波函数是

$$\psi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\boldsymbol{r})+\psi_2(\boldsymbol{r})]\,|\,a\rangle, \tag{1.3.1}$$

此处 $\boldsymbol{r}$ 是原子的质心坐标. $|a\rangle$代表原子的内部状态 $63p_{3/2}$. 在屏幕上(坐标 $\boldsymbol{R}$)的几率密度由 $|\psi|^2$ 给出:

$$\begin{aligned}P(\boldsymbol{R})=|\psi|^2&=\frac{1}{2}[|\psi_1|^2+|\psi_2|^2+(\psi_1^*\psi_2+\psi_2^*\psi_1)]\langle a\mid a\rangle\\&=\frac{1}{2}[|\psi_1|^2+|\psi_2|^2+(\psi_1^*\psi_2+\psi_2^*\psi_1)].\end{aligned} \tag{1.3.2}$$

方括弧中第三项表示干涉. 微脉泽腔可以使位于 $63p_{3/2}$ 态的原子发射微波光子(约 21GHz)而跃迁到 $61d_{5/2}$(记为$|b\rangle$)或 $61d_{3/2}$(记为$|c\rangle$). 设腔调谐到跃迁$|a\rangle\rightarrow|b\rangle$,原子通过后发射光子,可以从哪一个腔中出现光子判断原子的路径. 发射光子后原子内部状态发生变化,但质心坐标的空间波函数不变③. 由于发射光子,原子与微脉泽腔的状态出现了关联. 原子-腔

① 参阅本书第 8 章 8.4 节.

② 参阅本书第 8 章.

③ 不计发射微波光子导致的原子动量变化.

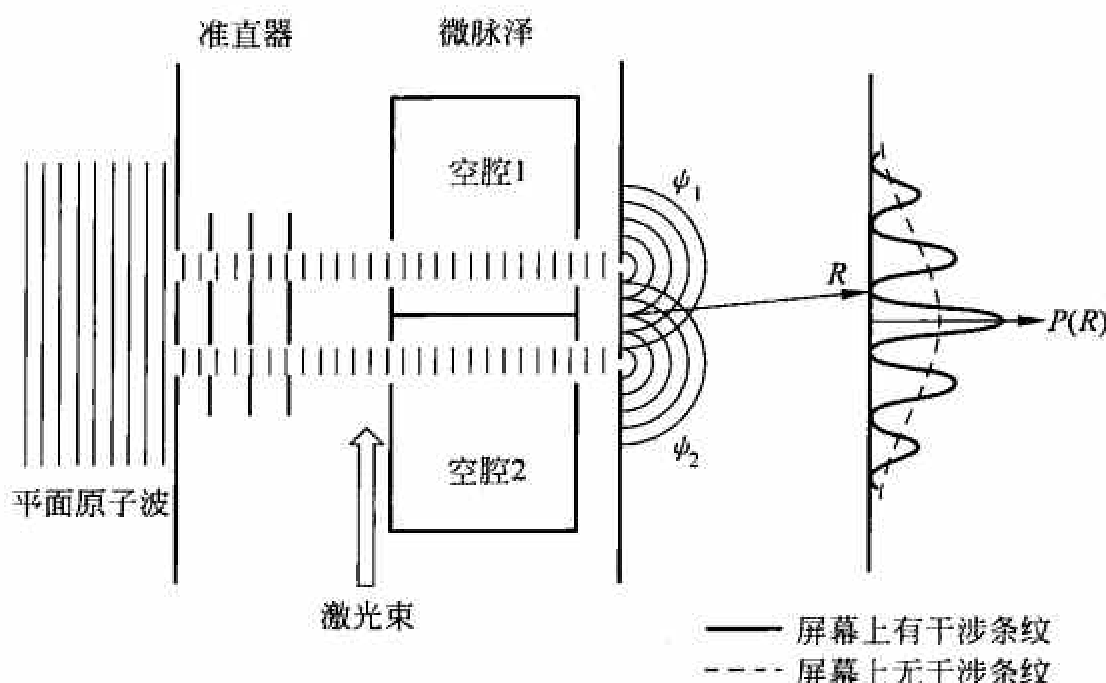


图 1.11 通过微脉泽腔的双缝干涉

体系的状态是

$$\psi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\boldsymbol{r})\mid 1_1 0_2\rangle+\psi_2(\boldsymbol{r})\mid 0_1 1_2\rangle]\mid b\rangle, \tag{1.3.3}$$

此处$|1_1 0_2\rangle$代表腔 1 有 1 个光子，腔 2 没有. $|0_1 1_2\rangle$可类推. 状态(1.3.3)与式(1.3.1)根本不同处在于式(1.3.3)不再能像式(1.3.1)那样写成原子波函数与光子自由度的乘积①，而是 Schrödinger 缠绕态. 计算屏幕上的几率密度，得

$$\begin{aligned}P(\boldsymbol{R})&=\frac{1}{2}[|\psi_1|^2+|\psi_2|^2+\psi_1^*\psi_2\langle 1_1 0_2\mid 0_1 1_2\rangle+\psi_2^*\psi_1\langle 0_1 1_2\mid 1_1 0_2\rangle]\langle b\mid b\rangle\\&=\frac{1}{2}[|\psi_1|^2+|\psi_2|^2],\end{aligned} \tag{1.3.4}$$

这是因为$|1_1 0_2\rangle$与$|0_1 1_2\rangle$正交. 可见，只要存在判断原子走"哪一条路径"的可能，干涉便消失了，根本用不着去测量，这里 Heisenberg 不确定关系并没有发挥作用. 干涉消失是原子质心波函数和光子自由度的关联所致.

从以上的讨论和 1.2 节的讨论可以看到并协原理得以实现，在不同的具体情况下会有不同的机制. 1.2 节的讨论涉及相干的部分恢复问题，在本节的讨论中相干的消失是由于原子与光子自由度产生了关联. 那么如果能抹去这个关联. 相干能否恢复？ 这就是量子涂消器(the quantum eraser)的思想. 下面讨论的是一个原理性的涂消器，实现是不容易的. 考虑图 1.12 中的原子-微脉泽腔系统. 两个腔用探测器-光闸体系隔开，探测器初态是它的基态$|g\rangle$. 如果它吸收了一个光子，就跃迁到激发态$|e\rangle$. 当原子通过了双缝之后，打开光闸，"符合条件"的光子遇到探测器就被吸收，两个腔都处于基态. 此时"哪一个路径"的信息就被抹去. 重要的一点是，此时原子已通过双缝，打开光闸和光子被吸收是不可能在物理上影响原子的②. 难道相干能恢复吗？ 答案是肯定的，但需要探测器有一种特殊性质. 光闸打开之前，原子-腔-探测器体系的波函数是

---

① 例如式(1.3.1)便是 $\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\boldsymbol{r})+\psi_2(\boldsymbol{r})]\mid a\rangle\right\}\mid 0_1 0_2\rangle$.

② 这种措施称为"推迟选择"(delayed choice)，参阅 1.9 节.

$$\psi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\boldsymbol{r})\ |1_1 0_2\rangle+\psi_2(\boldsymbol{r})\ |0_1 1_2\rangle]\ |b\rangle\ |g\rangle. \tag{1.3.5}$$

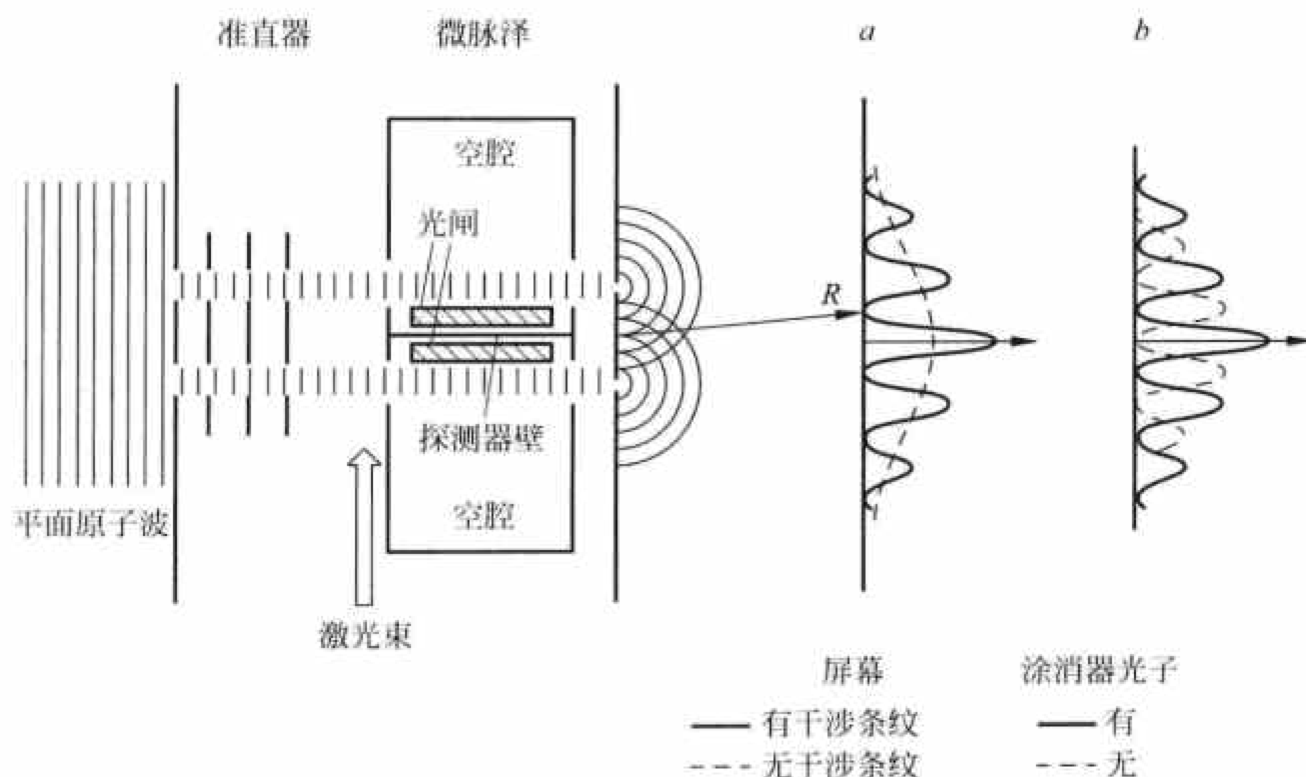


图 1.12 量子涂消器

定义原子质心波函数的对称态 ψ_+ 和反对称态 ψ_-：

$$\psi_\pm(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\boldsymbol{r})\pm\psi_2(\boldsymbol{r})], \tag{1.3.6}$$

以及腔辐射场的对称态 $|+\rangle$ 及反对称态 $|-\rangle$

$$|\pm\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}[|1_1 0_2\rangle\pm|0_1 1_2\rangle]. \tag{1.3.7}$$

波函数式(1.3.5)可以改写作

$$\psi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_+(\boldsymbol{r})\ |+\rangle+\psi_-(\boldsymbol{r})\ |-\rangle]\ |b\rangle\ |g\rangle, \tag{1.3.8}$$

如果探测器只对光子 $|+\rangle$ 态灵敏而对 $|-\rangle$ 态不灵敏①，则在光闸打开之后总体系波函数就变为

$$\psi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_+(\boldsymbol{r})\ |0_1 0_2\rangle\ |e\rangle+\psi_-(\boldsymbol{r})\ |-\rangle\ |g\rangle]\ |b\rangle. \tag{1.3.9}$$

第一项来自原(1.3.8)式中的光子 $|+\rangle$ 被吸收，变为无光子态，而探测器被激发到 $|e\rangle$ 态，第二项没有变化. 如果只求屏幕上的几率密度，则有

$$P(\boldsymbol{R})=\frac{1}{2}[|\psi_+(\boldsymbol{R})|^2+|\psi_-(\boldsymbol{R})|^2]=\frac{1}{2}[|\psi_1(\boldsymbol{R})|^2+|\psi_2(\boldsymbol{R})|^2], \tag{1.3.10}$$

没有干涉条纹. 但如求探测器位于激发态时屏幕上的几率密度，这时有

$$P_e(\boldsymbol{R})=\frac{1}{2}|\psi_+(\boldsymbol{R})|^2=\frac{1}{4}\{|\psi_1(\boldsymbol{R})|^2+|\psi_2(\boldsymbol{R})|^2+\mathrm{Re}[\psi_1^*(\boldsymbol{R})\psi_2(\boldsymbol{R})]\}, \tag{1.3.11}$$

---

① 这就是上文提到的"特殊性质". 探测器的作用是吸收光子从而使两个腔均处于基态而抹去了"哪一条路径"的信息，并不是提供原子从哪一个腔通过的信息.

干涉条纹重现. 如果只求探测器处于基态时屏幕上的几率密度，它是

$$P_g(\boldsymbol{R}) = \frac{1}{4}\{|\psi_1(\boldsymbol{R})|^2 + |\psi_2(\boldsymbol{R})|^2 - \mathrm{Re}[\psi_1^*(\boldsymbol{R})\psi_2(\boldsymbol{R})]\}, \tag{1.3.12}$$

干涉也存在. 由于干涉项与式(1.3.11)相比符号相反，可以称它为"反干涉条纹"，以虚线示于图1.9(b). 如果不理会探测器的状态，把所有到过屏幕的原子都记录下来，就有

$$P(\boldsymbol{R}) = P_e(\boldsymbol{R}) + P_g(\boldsymbol{R}) = \frac{1}{2}(|\psi_1(\boldsymbol{R})|^2 + |\psi_2(\boldsymbol{R})|^2),$$

和式(1.3.10)完全一样. 探测器提供量子涂消的机会. 如在确切涂消的情况(探测器处于激发态)再记录屏幕上的原子，则干涉条纹完全恢复，当然记录的粒子总数减半.

以上分析在原理上确立了量子涂消器的可能性. 相干的消失在于形成缠绕态. 如能设法取消缠绕(即取联合几率，丢开了式(1.3.9)中方括弧中的第二项)，则相干恢复. 重要的一点是，探测器的运作是在原子通过双缝以后. 因此原子显示波动性或粒子性并非探测器"打招呼"的结果，这是微观系统本来的性质，这一点在讨论Bell定理时还会再次遇到.

以上描述的量子涂消器说明原理很理想，但真正实现起来是困难的. 首先实现量子涂消器的是乔瑞宇的研究组，他们使用了双光子干涉. 我们将在1.6节讨论这个问题.

本节讨论的问题在1993年的一次会议上曾有过争论[9,10].

史砚华等人在2000年构成了"推迟选择"的量子涂消器，我们在1.6节中再讨论这个装置.

1.4　单光子干涉实验

Dirac在他的经典著作《量子力学原理》第一章中讨论了量子力学对光子干涉的描述："每个光子只和它自己干涉"，多年来有许多实验企图直接演示这个结论. 他们用不同的干涉仪，用减弱的光源，有的还有"反聚束装置"，以"保证"在干涉仪中同时刻只能有一个光子. 在实验中观察到干涉条纹，因此做出证实Dirac论断的结论. 20世纪80年代对光的统计性质中的非经典效应的研究发展，对这个看来无懈可击的结论提出了挑战.

A. Aspect, P. Grangier 和 G. Roger[11]用分束器做反符合实验，原理示于图1.13. 光源S发出光脉冲，射在分束器BS(beam splitter)上. 发出脉冲的同时触发器对计数装置开一个时间间隔为w的窗口. 光电倍增管PM_t和PM_r记录在透射(t)道和反射(r)道中的计数率N_t和N_r. 符合计数率为N_c. 令N_w为脉冲率，则反射、透射和符合计数几率分别为

$$P_r = \frac{N_r}{N_w},\quad P_t = \frac{N_t}{N_w},\quad P_c = \frac{N_c}{N_w}. \tag{1.4.1}$$

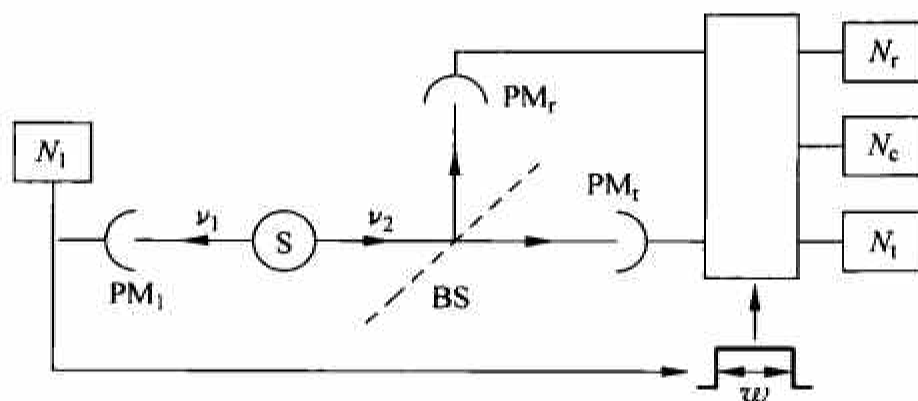


图1.13　检验光源单光子发射的装置

先从光的经典波动描述出发，设在一个时间窗口内平均光强为 i，在分束器处光分为两束．令 α_t 代表分束器透射效率和透射道探测器效率的乘积，则有

$$P_t = \alpha_t w i.$$

类似地，有

$$P_r = \alpha_r w i,$$

$$P_c = \alpha_r \alpha_t w^2 i^2.$$

对许多脉冲（窗口）做系综平均，有

$$P_t = \alpha_t w \langle i \rangle,$$

$$P_r = \alpha_r w \langle i \rangle,$$

$$P_c = \alpha_t \alpha_r w^2 \langle i^2 \rangle.$$

据 Cauchy-Schwartz 不等式，$\langle i^2 \rangle \geqslant \langle i \rangle^2$，有

$$P_c \geqslant P_t P_r. \tag{1.4.2}$$

定义

$$\alpha = \frac{N_c/N_w}{\dfrac{N_t}{N_w}\dfrac{N_r}{N_w}}, \tag{1.4.3}$$

则有

$$\alpha \geqslant 1. \tag{1.4.4}$$

如果光源发出的是光子，则这个装置应给出 $P_c=0$，因为光子只能进入一个道，反射道或透射道，亦即 $\alpha=0$.

Aspect 研究组用光二极管进行测量．减弱的光源相当于 1 个计数/1 000 脉冲．探测器效率约为 10%，相当于一个脉冲只有 0.01 个光子．测量结果 $\alpha \approx 1$，这说明一般光源不论多么弱，只呈现经典性质．在经典光源中有宏观数量的原子处于激发态，可能有若干原子同时发射光子．自发发射是随机的．经典光源的光子发射统计性质是 Poisson 分布．不论光源如何弱（即发射两个光子的平均间隔时间如何长），一个光子从光源发出，立即有第二个光子发出的几率是有限的，即不为 0．激光也属经典光源．用经典光源所进行的干涉实验不能认为是对光子只能和自己干涉的确切证明．这个证明必须用非经典光源，即 α 值要比 1 小得很多（由于窗口 w 有限，偶然符合使 α 不能严格为 0）．Aspect 研究组制成了"单原子发射光源"．用激光双光子共振激发 Ca 原子束，到 $4p^2\,{}^1S_0$ 态，它级联发射两个光子（相间 4.7ns）．能级及跃迁示于图 1.14．第一个光子可用于触发光子探测器，第二个光子进入分束器．在实验条件下有另一个 Ca 原子同时发射一个光子并也进入分束器的可能性很小．在触发率为 8 800s^{-1}时计数 5 个小时，得出的结果是 $\alpha=0.18\pm0.06$，与最小经典值 $\alpha=1$ 比有 13 个标准偏差．

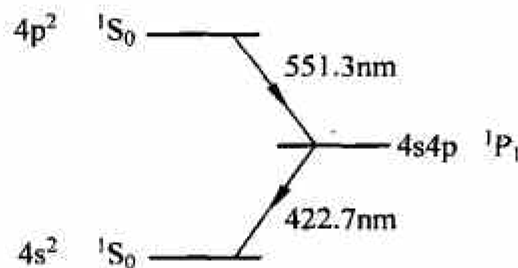


图 1.14 Ca 原子辐射级联，用于单原子发射光源

用单原子发射光源进行了干涉实验，图 1.15 是干涉仪示意图．MZ_1 和 MZ_2 是光电倍增管，虚线代表镀膜的分束器 BS_1 和 BS_2．通过移动反射镜可以调节两臂的光程差．光波在分束器上反射的一束和透射的一束相比有相角差 $\pi/2$．因此如果两臂长度相等，进入 MZ_1 的两束相差为 0，而进入 MZ_2 的两束相差为 π．因此 MZ_2 中不应有计数．当

两臂长度差连续变化时，两个探测器中计数周期变化而彼此正好反相. 结果示于图1.16(计数时间15s/道). 光程差用通道数表示，一道相当于$\lambda/50$. 这个实验相当于光源参数$\alpha=0.18$. 结果表明，基本上同时只有一个光子处于干涉装置之内，它实现了自己和自己的干涉.

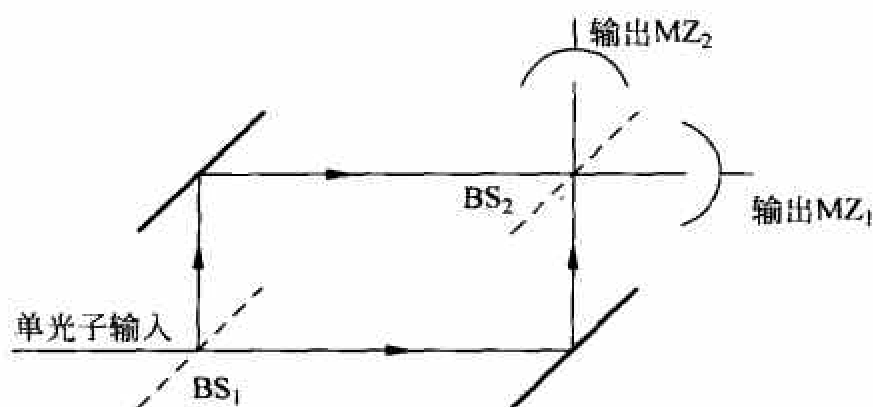


图1.15 Mach-Zender干涉仪示意图

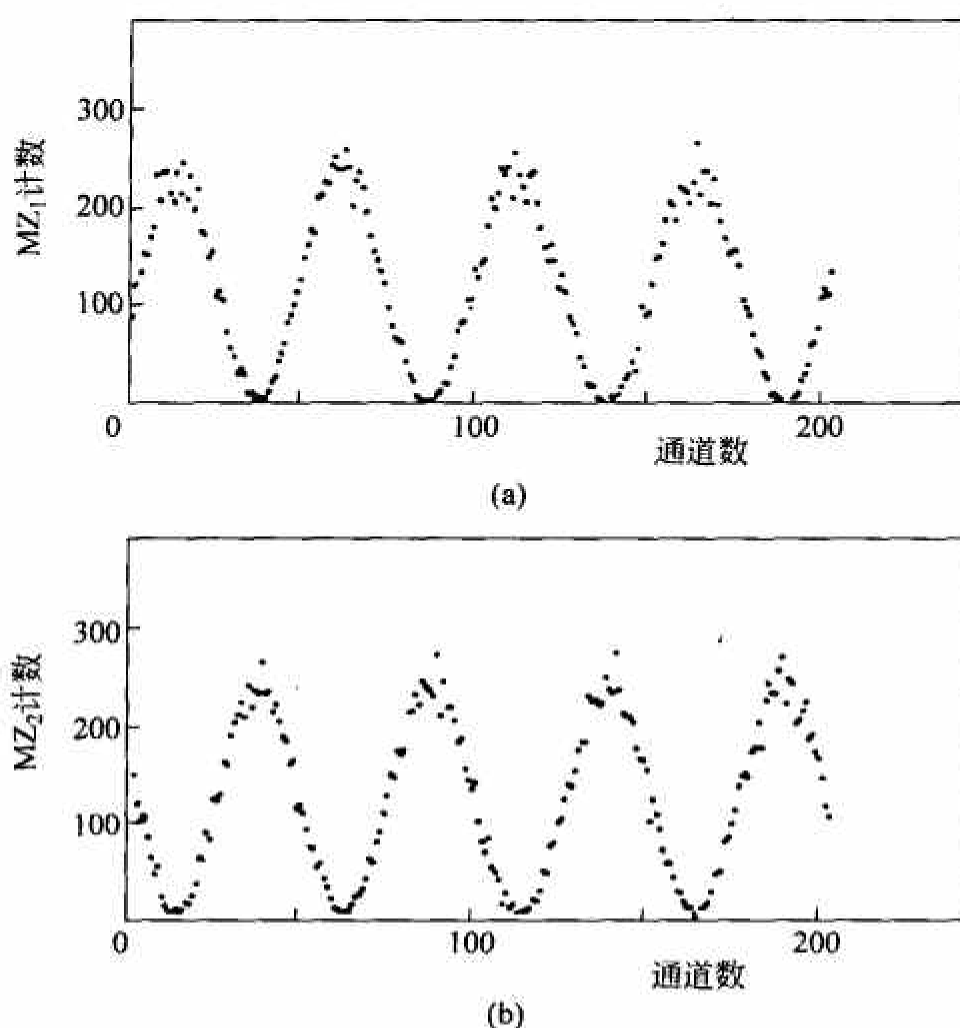


图1.16 MZ_1和MZ_2的输出计数，作为光程差的函数

1.4.1 独立光子束之间的干涉

一束光在分束器上分为两个分量，它们此后重合并发生干涉. Dirac[12]强调，每个光子只和它自己干涉，两个不同光子间的干涉永不会发生. 入射束中每一个光子都分为两个分量. 每个光子最终都和它自己干涉，即它的两个分量间发生干涉. Dirac的判断没有预言、也没有否定两个独立光子是否干涉，或两个独立光束相重叠时是否干涉.

A. T. Forrester, R. A. Gudmundsen和P. Q. Johnson[13]进行了一个实验，他们观测到

两个频率稍有不同的非相干光阵列的拍频现象. 他们用的是^{202}Hg光源的546.1nm谱线的两个Zeeman分量. 这两个分量显然是从同一光源的不同原子发射出来的. 光聚焦在光阴极上，被击出的电子引入微波腔，在腔中测出电子发射的周期性. 由于不同谱线的非相干性以及光阴极上不同地点拍频间的非相干性，测量的信号与噪声比极低，仅为3×10^{-5}. 在保持总强度为常数情况下采用拍频的光调制，信号与噪声比提高到2. 拍频现象可以理解为干涉，因为这个现象体现了电磁场叠加的效应：是场强叠加而不是强度叠加. R. Hanbury Brown和R. Q. Twiss[14]研究了星体(热光源)的强度涨落. 他们测量了两个探测器光电流的关联函数：

$$G^{(2)}(\boldsymbol{r}_1,t;\ \boldsymbol{r}_2,t)=\langle I(\boldsymbol{r}_1,t)I(\boldsymbol{r}_2,t)\rangle, \tag{1.4.5}$$

此处⟨⟩是作为两个探测器间距离$|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$函数的系综平均. 他们得到有趣的结果：$G^{(2)}$在$|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|=0$处呈现极大值，并且在$|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$增大时逐渐减小到一个常数值. 在$G^{(2)}$减小到常数值时的相应$|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$就是星体光到达地球时的横向相干长度. 这是两个非相干光源间的干涉现象，作者用来估计星体的直径. 从量子力学的观点看，这个现象是一种选择(光子1进入探测器Ⅰ，光子2进入探测器Ⅱ)与另一种选择(将两个光子交换)间的干涉.

许多研究者用激光束进行研究，发现在光束经过高度减弱之后仍能观察到干涉现象. R. L. Pfleeger和L. Mandel[15]采用了两个独立操控的单模激光. 将光束减弱到一个光子被记录之后下一个光子才被光源发射出来的程度. 这时干涉现象仍能观察到. 由于每一轮实验记录的光子平均数目只有约10个，采用了光子关联技术得以展示干涉现象. 作者测得了关联系数. 对上述这些实验，经典电磁场理论得出的结果与实验完全符合，甚至在光束高度减弱时也是如此. 理由是，对Glauber态$|\alpha\rangle\equiv||\alpha|e^{i\theta}\rangle$光束减弱可以使振幅减小，但相位不受影响，干涉的相位关系维持不变. H. Paul[16]计算了强度关联函数式(1.4.5). 他考虑两个位于$\boldsymbol{r}_{\mathrm{I}}$与$\boldsymbol{r}_{\mathrm{II}}$并发出光子$\boldsymbol{k}_1$与$\boldsymbol{k}_2$的Hertz偶极振子. 光子在$\boldsymbol{r}_1$与$\boldsymbol{r}_2$处进入探测器，得到的结果是：

$$G^{(2)}(\boldsymbol{r}_1,t;\ \boldsymbol{r}_2,t)=4f^4\,\bar{a}^4\left\{1+\frac{1}{2}\cos[(\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_1)(\boldsymbol{r}_{\mathrm{II}}-\boldsymbol{r}_{\mathrm{I}})]\right\}, \tag{1.4.6}$$

此处f是与$e^{-i\omega t}$因子相配的电场$\boldsymbol{E}^{(+)}$的振幅，$\bar{a}(t)=e^{-2\Gamma_i t/2}$是偶极振子算符的阻尼因子. $G^{(2)}(\boldsymbol{r}_1,t;\ \boldsymbol{r}_2,t)$对$|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$的依赖通过$\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_1$实现，假定两个偶极子间的距离比源——探测器距离要小得多.

当我们研究两个受激原子发射的光子干涉时，情况要发生变化. 这时电磁场不再能用Glauber态的密度矩阵描述了. 电磁场应是量子化的，光子是电磁场的量子. 令$\boldsymbol{E}^{(\pm)}(\boldsymbol{r},t)$代表在$(\boldsymbol{r},t)$电磁场的正、负频率部分，分别与湮灭算符和产生算符相配. 干涉由以下强度关联函数描述：

$$G^{(2)}_{\mathrm{qu}}(\boldsymbol{r}_1,t;\ \boldsymbol{r}_2,t)=\sum_{i,j}\left\langle E_i^{(-)}(\boldsymbol{r}_1,t)E_j^{(-)}(\boldsymbol{r}_2,t)E_j^{(+)}(\boldsymbol{r}_2,t)E_i^{(+)}(\boldsymbol{r}_1,t)\right\rangle. \tag{1.4.7}$$

求和$i,j=1,2,3$. 结果得到

$$G^{(2)}_{\mathrm{qu}}(\boldsymbol{r}_1,t;\ \boldsymbol{r}_2,t)=2f^4\,\bar{a}^4\{1+\cos[(\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}_1)(\boldsymbol{r}_{\mathrm{II}}-\boldsymbol{r}_{\mathrm{I}})]\}. \tag{1.4.8}$$

将式(1.4.8)与式(1.4.6)比较，可以看出经典理论和量子理论有明显差别. 经典$G^{(2)}$的可能极小值是它的平均值的1/2，而量子理论的$G^{(2)}_{\mathrm{qu}}$的极小值是0. 量子理论给出的关联要强得多. 如Paul所指出的[16]，在Glauber相干态中经典理论与量子理论的等价性是由于光子数不确定，而且没有上限. 但当我们处理的是两个受激原子的场时，光子数是有限的. 在此情况下经典理论与量子理论不同.

最后要讨论这些实验是否和 Dirac 的断言矛盾. L. Mandel[17] 指出它们不矛盾. 实际上确实有两个光子被记录下来，他们的关联和相对相位有关，即观测到干涉现象. 关键之处在于，是否可以将每个光子和两个原子分别联系起来. 如果答案是肯定的，干涉就是在两个独立光子之间进行的. 但实际情况恰恰相反. 由光电测量记录下的光子排斥了确定光子动量的可能性，也就排斥了将光子归于两个原子(或两束光)之一的可能性. Pfleeger 和 Mandel[15] 用不确定性关系演示了这个结论. 这样就和常规的干涉学一样，每个光子都是部分地属于一束，部分地又属于另一束，而自己和自己干涉. 每个记录的光子是由两束建立的量子化电磁场的一个量子，它不属于哪个特定的束(原子)，或者说，它属于两个束(原子). 两个原子间的干涉现象将在 1.5 节进一步讨论. Paul 在[16]中的提法，"Dirac 关于两个不同光子之间的干涉永不会发生的论述是不正确的"是不合适的.

1.5 多粒子干涉学

从 20 世纪 80 年代开始，一些实验室利用激光在非线性晶体中的"下转换"(down conversion)产生一对光子. 这种过程可以用来构成"二光子缠绕态"，从而制成二粒子干涉仪. 首先提出这个想法的是 M. A. Horne 和 A. Zeilinger[18,19]，不少研究组都建立了设备，用此来集中研究量子力学基本问题的先导是 L. Mandel 所领导的研究组. 这个研究方向呈现了光的新的非经典性质，并对 Bell 不等式的破坏给予了更精确的实验验证. 新的研究结果不断涌现.

1.5.1 二粒子双缝干涉学

如图 1.17 所示，在 O 处有粒子源，长度为 d(图中未标出). 设有一位于 S 处的粒子衰变产生两个粒子. 由于衰变粒子是静止的，因此两个衰变产物的动量基本上是相反的. A，B 与 A'，B'是两对小孔. 一对衰变产物可以通过 A 和 A'落到探测屏幕上的 P 和 P'点，但它们也可以通过 B 和 B'落到这两点. 这一对粒子的状态以

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|A\rangle_1\,|A'\rangle_2 + |B\rangle_1\,|B'\rangle_2) \tag{1.5.1}$$

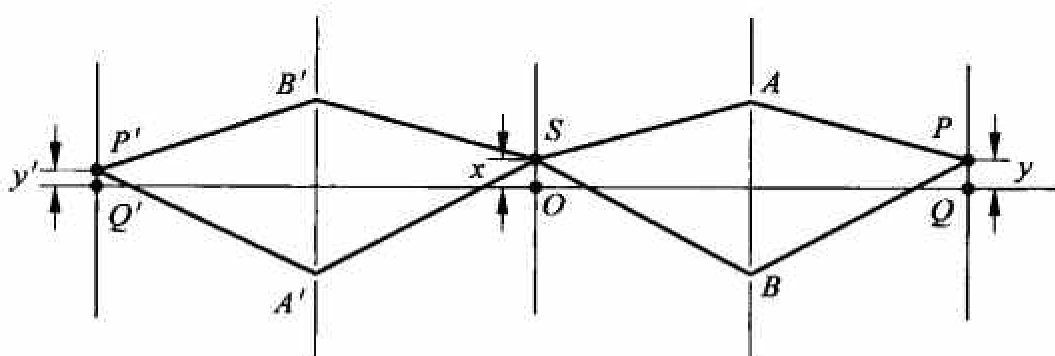


图 1.17 二粒子干涉示意图

表示. 式中$|A\rangle$代表粒子动量指向 A 点的状态，其余也类似定义. 这一对粒子最终到达 P 和 P'，但它们各有两个选择，一个粒子可以选 SAP 或 SBP，另一个相应地选 $SA'P'$或 $SB'P'$. 令衰变粒子距 O 为 x，记录点 P 距 Q 为 y，P'距 Q'为 y'，并令 L 代表 OAQ 距离，θ 为$\angle AOQ$，则有

$$SAP = L - x\theta - y\theta,$$

$$SBP = L + x\theta + y\theta.$$

在 P 处的几率幅为

$$\psi(P) \propto e^{ikL}(e^{-ik(x+y)\theta} + e^{ik(x+y)\theta}) \propto \cos\frac{2\pi}{\lambda}(x+y)\theta, \tag{1.5.2}$$

此处波矢 $k=2\pi/\lambda$，λ 为 de Broglie 波长. 如要测由于源上各粒子衰变产物在 P 与 P' 处的符合计数，则其几率幅为

$$\psi(y,y') \propto \frac{1}{d}\int_{-d/2}^{d/2} dx \cos\frac{2\pi}{\lambda}(x+y)\theta \cos\frac{2\pi}{\lambda}(x+y')\theta. \tag{1.5.3}$$

将被积分函数进行变换：

$$\cos\frac{2\pi}{\lambda}(x+y)\theta\cos\frac{2\pi}{\lambda}(x+y')\theta = \frac{1}{2}\cos\frac{2\pi}{\lambda}(y-y')\theta + \frac{1}{2}\cos\frac{2\pi}{\lambda}(2x+y+y')\theta,$$

因此有

$$\psi(y,y') \propto \frac{1}{2}\cos\frac{2\pi}{\lambda}(y-y')\theta + \frac{1}{2d}\int_{-d/2}^{d/2} dx \cos\frac{2\pi\theta}{\lambda}(2x+y+y'). \tag{1.5.4}$$

讨论两种极限情况：

(1) $d \gg \frac{\lambda}{\theta}$，此时式(1.5.4)中第二项很小，可以略去. 第一项正是"条件性条纹"，即如确定 P' 点并令 P 变化，二处的符合计数将周期变化；如确定 P 点，令 P' 变化，情况也一样. 这称为双粒子干涉. 正是由于一对粒子都有相对应的两种选择，这两条路径就要产生干涉.

(2) $d \ll \frac{\lambda}{\theta}$，这样 x 在式(1.5.3)被积分函数中可以忽略，得到

$$\psi(y,y') \propto \cos\frac{2\pi}{\lambda}y\theta\cos\frac{2\pi}{\lambda}y'\theta, \tag{1.5.5}$$

这是两个独立的单粒子干涉的乘积，两个粒子独立地自己和自己干涉. 从动量空间分析，很容易理解以上两种情况.

(1) 根据不确定性原理，粒子横向动量的不确定性为 $\delta k_\perp \propto \frac{1}{d}$. 如 $d \gg \lambda/\theta$，则有

$$\delta k_\perp \ll \frac{\theta}{\lambda}, \quad \frac{\delta k_\perp}{k_\perp} \ll \frac{\theta}{2\pi}. \tag{1.5.6}$$

每个粒子的横向坐标不确定性太小，不足以包括 A，B(或 A'，B')两个孔，因此它们都无法和自己干涉，没有单粒子条纹.

(2) 如 $d \ll \frac{\lambda}{\theta}$，则有 $\frac{\delta k_\perp}{k_\perp} \gg \frac{\theta}{2\pi}$，每个粒子都可以"照亮"自己一侧的两个孔，因此就有单粒子条纹. 但由于横向动量不确定性太大，无法保证一个粒子通过 A 就有另一个粒子通过 A' 的对应(B，B' 也是如此). 因此就破坏了二粒子缠绕态(式(1.5.1))，不能产生二粒子条件性条纹.

从以上分析可以看到二粒子干涉与单粒子干涉的一个重大不同. 以光子而论，单粒子干涉可以用电磁波动理论描述，但双光子干涉是从缠绕态开始的，这基于量子力学的原理，因此是非经典性的，是非经典光学现象.

1.5.2 下转换光子干涉实验

激光通过非线性晶体的下转换使原有光子 $\boldsymbol{k}$ 转变为两个相互关联光子 $\boldsymbol{k}_A$ 和 $\boldsymbol{k}_C$，并有

$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_A+\boldsymbol{k}_C$. 实验[20]和理论[21]显示，在$|\boldsymbol{k}_A|\neq|\boldsymbol{k}_C|$情况下，可以获得相对于入射光子方向不对称的下转换光子(图1.18). 如图1.19所示，在下转换晶体S右方的光阑上取4个针孔，使从晶体中射出的关联光子对可以有两种选择：或选A,C方向，或选D,B方向，并且有

$$|\boldsymbol{k}_A|=|\boldsymbol{k}_D|,\quad |\boldsymbol{k}_B|=|\boldsymbol{k}_C|. \tag{1.5.7}$$

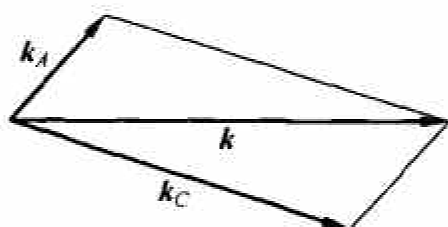


图1.18　不对称下转换光子对

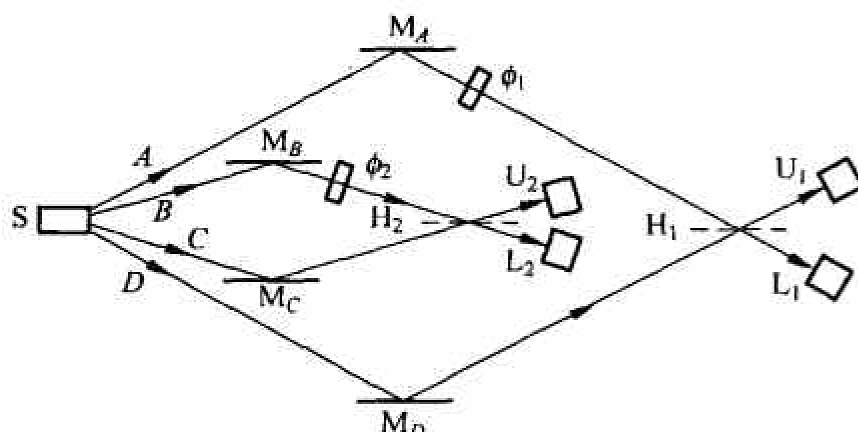


图1.19　二粒子干涉仪示意图

这样就获得一对关联光子的缠绕态：

$$|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}[|\boldsymbol{k}_A\rangle_1|\boldsymbol{k}_C\rangle_2+|\boldsymbol{k}_D\rangle_1|\boldsymbol{k}_B\rangle_2]. \tag{1.5.8}$$

在干涉仪(图1.19)装置中，光子沿A经反射镜M_A到移相器ϕ_1，再到分束器H_1，从此它或进入探测器U_1，或进入L_1. 相应于此，另一个光子沿C经反射镜M_C到达分束器H_2，从此它或进入探测器U_2，或进入L_2. 以上是这对光子的第一种选择. 它们的另一种选择是第一个光子沿D经M_D，H_1进入U_1或L_1，第二个光子沿B经M_B，ϕ_2，H_2进入U_2或L_2. 探测器U_1和L_1接受的是第一个光子两条可能选择的路径A,D复合后的结果，U_2和L_2则是第二个光子两条可能选择的路径B,C复合后的结果. 需测量的是二光子的符合计数率，它作为相移ϕ_1和ϕ_2的函数，然后和量子力学理论计算进行比较.

设探测器的量子效率为η，则探测器U_1,U_2的符合计数率为$\eta^2|A(U_1U_2|\phi_1\phi_2)|^2$，此处$A(U_1U_2|\phi_1\phi_2)$是作为$\phi_1,\phi_2$函数的$U_1U_2$符合几率幅，它是和两对相关联路径(即$AC$与$DB$)的几率幅的叠加：

$$A(U_1U_2\mid\phi_1\phi_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2}\right)\right], \tag{1.5.9}$$

此处$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1}$，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2}$是在沿$A$与$B$路径通过相移器获得的相因子，$\frac{1}{\sqrt{2}}$与$\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{i}$分别对应在分束器处的透射与反射. 在上式的方括弧中每项都有两个因子分别对应相互关联的第一个与第二个光子的路径. $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$与反射镜和分束器的安排有关，与$\phi_1,\phi_2$无关. 类似地可以得到

$$A(U_1L_2\mid\phi_1\phi_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{i}\right)+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_2}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\right],$$

以及$A(L_1U_2|\phi_1\phi_2)$，$A(L_1L_2|\phi_1\phi_2)$. 两个探测器的符合计数率分别是η^2乘以符合几率幅的模平方：

$$P(U_1U_2\mid\phi_1\phi_2)=P(L_1L_2\mid\phi_1\phi_2)=\eta^2\left[\frac{1}{4}+\frac{1}{4}\cos(\phi_2-\phi_1+\theta)\right], \tag{1.5.10}$$

$$P(U_1L_2 \mid \phi_1\phi_2) = P(L_1U_2 \mid \phi_1\phi_2) = \eta^2\left[\frac{1}{4} - \frac{1}{4}\cos(\phi_2 - \phi_1 + \theta)\right]. \quad (1.5.11)$$

符合计数率显示出二粒子干涉. 如果只记录一个探测器(例如 U_1)的计数率,就有

$$P(U_1 \mid \phi_1\phi_2) = P(U_1U_2 \mid \phi_1\phi_2) + P(U_1L_2 \mid \phi_1\phi_2) = \frac{\eta^2}{2}, \quad (1.5.12)$$

同样有

$$P(U_2 \mid \phi_1\phi_2) = P(L_1 \mid \phi_1\phi_2) = P(L_2 \mid \phi_1\phi_2) = \frac{\eta^2}{2}. \quad (1.5.13)$$

一对关联光子的干涉现象把 Dirac 的名言做了补充:"一对关联光子只和自己这一对干涉."

文献[18]在此基础上讨论了以上实验安排的变种,包括了许多研究组的双粒子干涉仪.

这和 Dirac 的名言"两个不同光子之间的干涉永不会发生"是否矛盾? 回答是不矛盾. 两个下转换光子处于缠绕态. 这对光子的路径有两种缠绕的选择: 或是 A 与 C,或是 D 与 B. 干涉是在这两种选择间发生,而不是在两个光子间发生. 实际上这两个光子根本不相逢: 一个进入探测器 U_1 或 L_1,另一个进入 U_2 或 L_2. 这种情况在洪、欧和 Mandel[22] 的另一个实验中可以看得更清楚. 一对下转换光子在分束器上混合,每个光子都可以进入探测器 A 或探测器 B. 两个探测器的任何一个的计数都不呈现干涉(因此两个光子间没有干涉),而两个探测器的符合计数则可以显示干涉. 很明显,在分束器上产生的每个光子的两个分量间发生了干涉. Legero 等人[23] 的两个单光子量子拍频实验是另一个有趣的例子. 两个独立的光子长脉冲到达分束器. 一般说来两个脉冲到达的时间有一个间隔,当然间隔也可以是零. 每个脉冲都会进入探测器 A 或探测器 B. 一个探测器首先记录了光子. 这个测量将原始独立的两个光子缠绕起来. 两个探测器的符合测量缠绕光子对的相干. 每个光子都可以进入 A 或 B,但 A 或 B 的单独计数不呈现两个光子间的干涉,只有两个探测器的符合计数显示每个光子的两个模式(分量)之间的干涉.

1.5.3 发射时间的干涉

Mandel[24] 曾经指出,当两个独立的且在空间上分开的单原子光源使得两个探测器产生符合计数,且记录的两个光子中其中一个一定来自一个光源,而另一个来自另一个光源,只要没有关于究竟光子来自哪一个光源的信息,就会发生干涉. J. Franson[25] 提出另一个想法: 只要无法判断光子是在什么时间发出的,就存在二光子干涉. 乔瑞宇在 Franson 想法的基础上建立了高可见度干涉装置[26]①. 图 1.20(a)给出实验装置示意图,其中 M_1,M_2 是反射镜,Bl_1,Bl_2,$B2_1$,$B2_2$ 是分束器,F_1,F_2 是滤光片,D_1,D_2 是探测器. 图 1.20(b)是装置的简化图,图中一对下转换光子同时到达探测器 D_1 和 D_2. 在途中它们都有选择长途径和短途径的可能. 长短途径所需时间差在实验中是 4ns,而探测器的"同时",实际是在窗口 1ns 内. 由于两个光子在下转换中是同时产生,因此,它们或是都选了长途径,或是都选了短途径. 但装置中没有作出发射时间判断的可能,因此只能用线性组合表示这个缠绕态:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|s\rangle_1\ |s\rangle_2 + |l\rangle_1\ |l\rangle_2), \quad (1.5.14)$$

---

① 这个装置还对 Bell 不等式被破坏给予精确的演示,见 1.8 节.

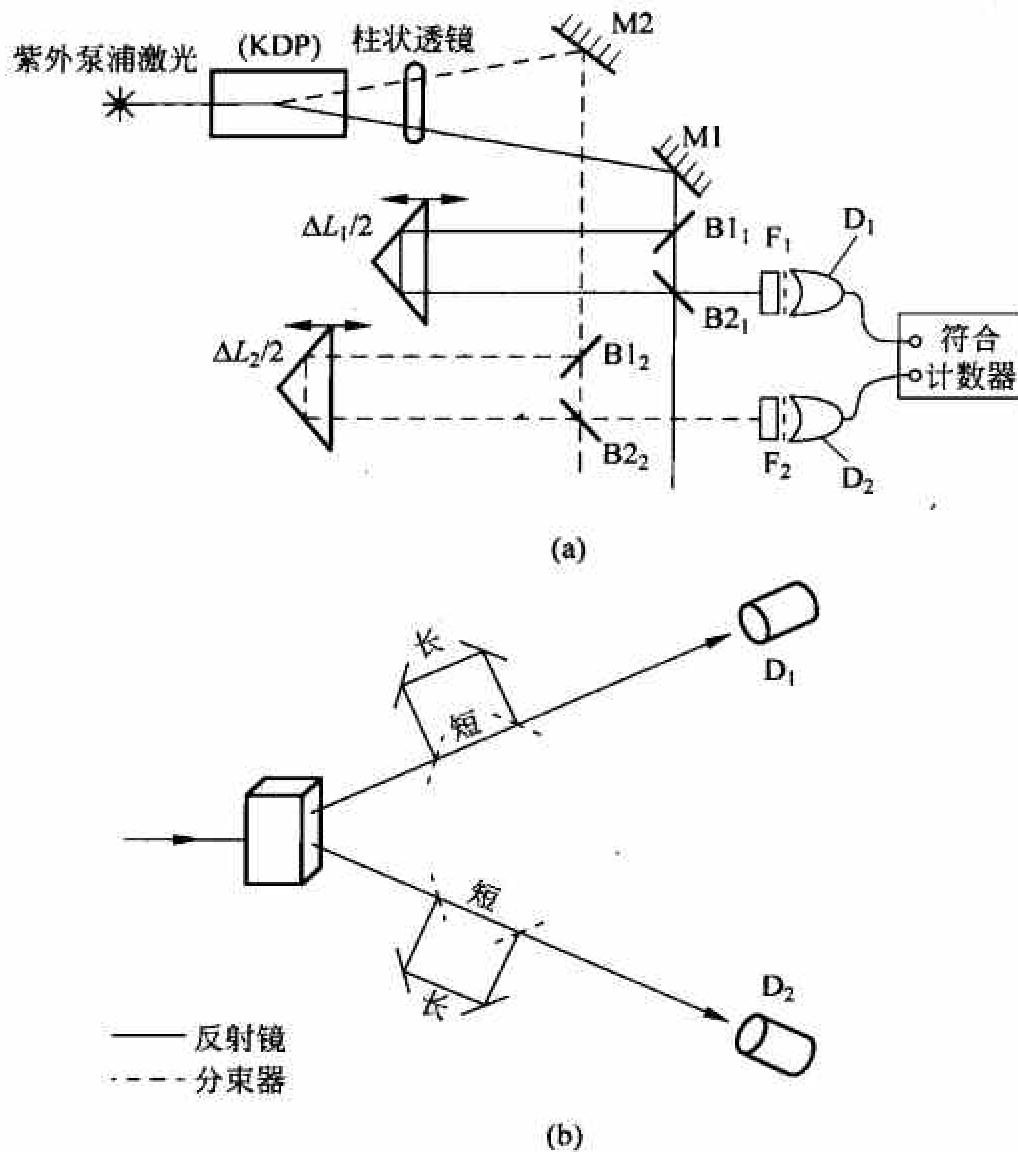


图 1.20　发射时间干涉仪装置示意图(a)及其简化图(b)

s 代表短途径，l 代表长途径. 变更一个光子的长途径长度(移动图 1.20(a)中的棱镜)就能改变 $|\psi\rangle$ 中两项的相对相角. 令 $\Delta L_i = L_i - S_i$，此处 $i=1,2$，而 L_i 与 S_i 分别代表光子 i 的长途径与短途径长度. $|\psi\rangle$ 中两项的相对相角是

$$\Delta\phi = \omega_1 \frac{\Delta L_1}{c} + \omega_2 \frac{\Delta L_2}{c} = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2c}(\Delta L_1 + \Delta L_2) + \frac{\omega_1 - \omega_2}{2}(\Delta L_1 - \Delta L_2),$$

此处 ω_1 与 ω_2 是两个光子的角频率. 在实验中选 $\omega_1 \approx \omega_2$，即 $\omega_1 - \omega_2 \approx 0$. 引入 $\omega_p = \omega_1 + \omega_2$，$\omega_p$ 是产生下转换光子的角频率. 因此

$$\Delta\phi = \frac{\omega_p}{2c}(\Delta L_1 + \Delta L_2). \tag{1.5.15}$$

探测器的符合计数率 R 满足下式：

$$R \propto |1 + e^{i\Delta\phi}|^2 = 2 + 2\cos\left[\frac{\omega_p}{2c}(\Delta L_1 + \Delta L_2)\right]. \tag{1.5.16}$$

理论上干涉的可见度应是 100%，实际上实验达到的是 80.4%.

在此后一个类似的实验[27]中，两个能量相同的下转换光子从非线性晶体同时发出在光纤中各自传播达到相距 10.5km 的两个干涉仪. 观测到的二光子干涉可见度达 81.6%. 缠绕态能够保持如此远的距离，不仅在理论上证实量子力学关联(并非鬼怪式的相互作用)，而且对量子信息学(量子密码与量子远程传递)也有实际意义.

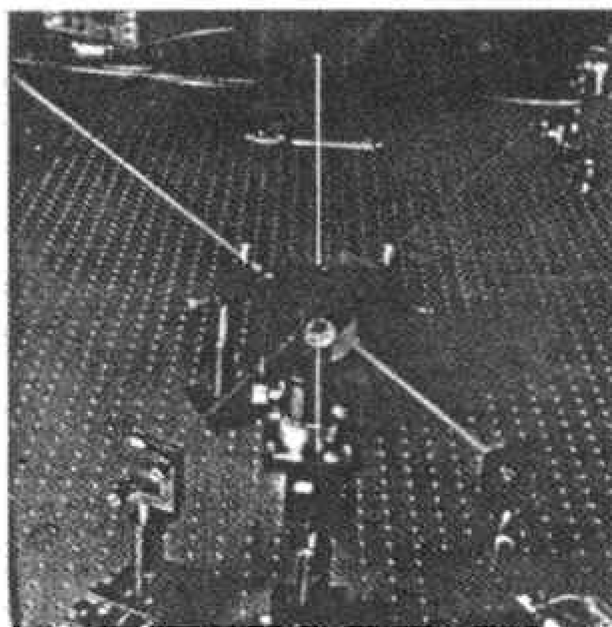
现在可以回到 1.4 节所讨论的经典光源问题. 通常具有大量能发出辐射的原子的光源被认为是经典源. 发出辐射原子数量很少的源不能认为是经典源，因为经典电磁理论已不适于描述这类光源，而应该用量子场论来描述. Mandel[24]发现场论的结果和经典电磁理论结

果相差很多.在大量原子数目极限下两种理论趋于一致.这是可以预期的.出人意料的是,当原子数量不大但具有 Poisson 涨落时,量子理论的预言也和经典理论一致.因此一个热光源,不论它是多么弱,也是一个经典光源,其反符合系数 α 接近于 1.起关键作用的是涨落.

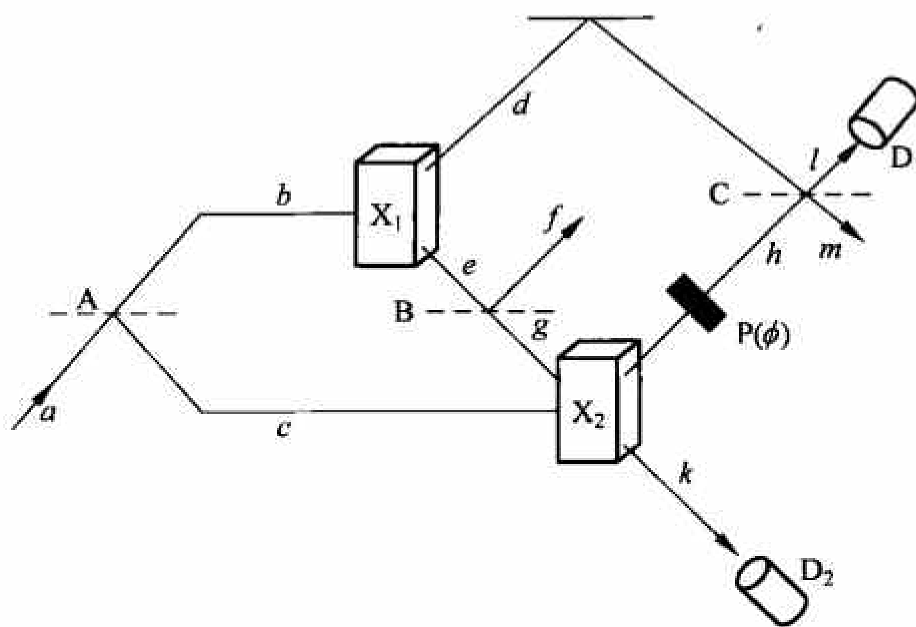
1.5.4 相干与路径可区分性

Feynman 有一句格言:"只有在一个装置中无法在物理上互相区分的状态才能干涉."邹兴宇、王力军和 Mandel 的实验[28]对这个原则给予了明确的证明.在图 1.21 中虚线 A,C 是分束器,入射的紫外光子在 A 处分为二束,各经反射进入非线性晶体 X_1 和 X_2.每个光子只能在一块晶体(X_1 或 X_2)中产生下转换,所以产生的是缠绕态

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|d\rangle_1\ |e\rangle_2+|h\rangle_1\ |k\rangle_2).$$



(a)



(b)

图 1.21

(a) 邹-王-Mandel 干涉仪在实验中;(b) 邹-王-Mandel 干涉仪示意图

束 d 和 h 都能进入 D_1.它们能干涉吗?如果能对 e 和 k 分别进行监察,就能判断 D_1 接收的是从哪一个晶体来的下转换光子:如 e 有计数,则进入 D_1 的一定是 d;如 k 有计数,则进入 D_1 的一定是 h.这样就不会有干涉.如果将 e 和 k 的路线重叠起来,就失去了判断的潜在可能,从而出现干涉.此时状态变为

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|d\rangle+|h\rangle)_1\ |k\rangle_2,$$

是乘积态而不是缠绕态.此时调节移相器 P 就出现 D_1 中的干涉.具体分析如下:在分束器 A(半透明)处,束 a 变为束 b 与 c 的线性组合,即有

$$|a\rangle\to\frac{|b\rangle+\mathrm{i}\ |c\rangle}{\sqrt{2}},$$

此处 i 表示反射束有 $\pi/2$ 相移.在 B 处(为了以下讨论,以实数 T 和 R 表示其透射和反射率),

$$|e\rangle\to T\ |g\rangle+\mathrm{i}R\ |f\rangle.$$

在 C(半透明)处,

$$|h\rangle\to\frac{|l\rangle+\mathrm{i}\ |m\rangle}{\sqrt{2}},\quad |d\rangle\to\frac{|m\rangle+\mathrm{i}\ |l\rangle}{\sqrt{2}}.$$

在移相器P处，

$$|h\rangle \to e^{i\phi}\,|h\rangle.$$

在下转换晶体处(令 η 为下转换系数，为 10^{-6} 量级)，

$$|b\rangle \to \eta\,|d\rangle_1\,|e\rangle_2,$$

$$|c\rangle \to \eta\,|h\rangle_1\,|k\rangle_2.$$

将 $|g\rangle$ 和 $|k\rangle$ 准直，有

$$|g\rangle \to |k\rangle.$$

将以上各过程总结，有

$$\begin{aligned}|a\rangle &\to \frac{1}{\sqrt{2}}(|b\rangle+\mathrm{i}\,|c\rangle) \to \frac{\eta}{\sqrt{2}}(|d\rangle_1\,|e\rangle_2+\mathrm{i}\,|h\rangle_1\,|k\rangle_2)\\ &\to \frac{\eta}{2}[(T-e^{i\phi})\,|m\rangle+\mathrm{i}(T+e^{i\phi})\,|l\rangle]_1\,|k\rangle_2\\ &\quad +\mathrm{i}\,\frac{\eta}{2}R(|m\rangle+\mathrm{i}\,|l\rangle)_1\,|f\rangle_2.\end{aligned} \tag{1.5.17}$$

求 D_1D_2 的符合计数率，选式(1.5.17)中 $|l\rangle_1|k\rangle_2$ 的系数，取其模平方即可，它是

$$\frac{\eta^2}{4}[(T+\cos\phi)^2+\sin^2\phi]=\frac{\eta^2}{4}(1+T^2+2T\cos\phi).$$

干涉条纹对比度是

$$\mathcal{V}=\frac{2T}{1+T^2}. \tag{1.5.18}$$

它随 T 而增加，从相应 $T=0$ 的 $\mathcal{V}=0$ 开始直到相应 $T=1$ 的 $\mathcal{V}=1$. 如果只测探测器 D_1 的计数率，它是 $|l\rangle_1|k\rangle_2$ 与 $|l\rangle_1|f\rangle_2$ 的系数模平方之和：

$$\begin{aligned}\frac{\eta^2}{4}[(T+\cos\phi)^2+\sin^2\phi]+\frac{\eta^2}{4}R^2&=\frac{\eta^2}{4}[1+T^2+2T\cos\phi+R^2]\\ &=\frac{\eta^2}{2}(1+T\cos\phi),\end{aligned}$$

最后的等式来源于 $T^2+R^2=1$，这时干涉条纹的可见度是

$$\mathcal{V}=T. \tag{1.5.19}$$

考虑到实际的实验参数，即入射光能量在晶体中下转换的比例分数、泵浦波的强度和交叉关联，与 T 正比关系的比例常数仅在极端情况下才为1[28]. 实验结果示于图1.22.

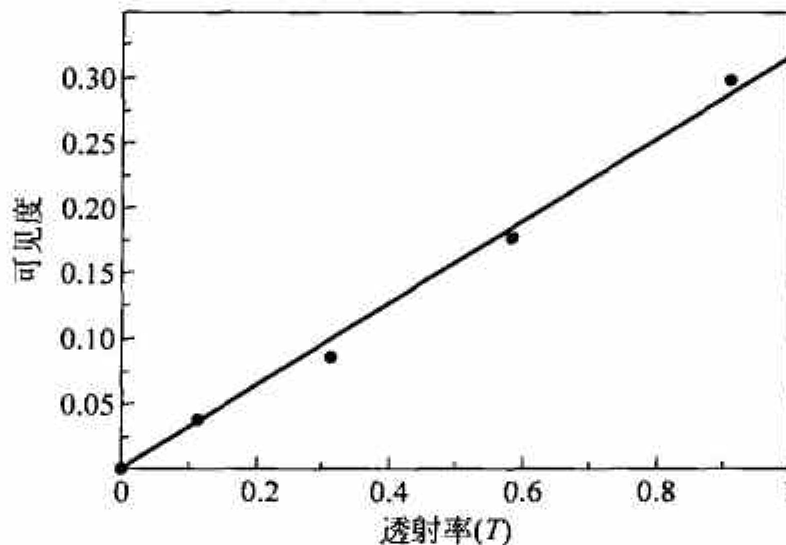


图1.22 可见度与透射率的关系，取自[28]

重要的是，虽然 D_2 这一束并不在相干路径内，它却能影响 D_1 这一束的干涉条纹可见度. D_2 这一束的作用是：使"从哪一条路来"(即从 X_1 还是从 X_2)的判断成为不可能. 一对下转换光子(或称共轭光子)是相互关联的. 操纵一个就能影响第二个. $T=0$ 导致 $\mathcal{V}=0$，是因为阻住 e 束就能根据 k 束有无光子判断 D_1 中光子是来自 X_1(k 束无光子)还是来自 X_2(k 束有光子)，这样 D_1 就不可能看到干涉条纹. 在图 1.23 中，探测器 D_1 中的计数率 R_S 绘为曲线 A. 它是图 1.21(b)中分束器 C 位移的函数，或等价地是图 1.21(b)中相移器相位 ϕ 的函数. 当辅助束 e 被阻挡时($T=0$)计数率绘为曲线 B.

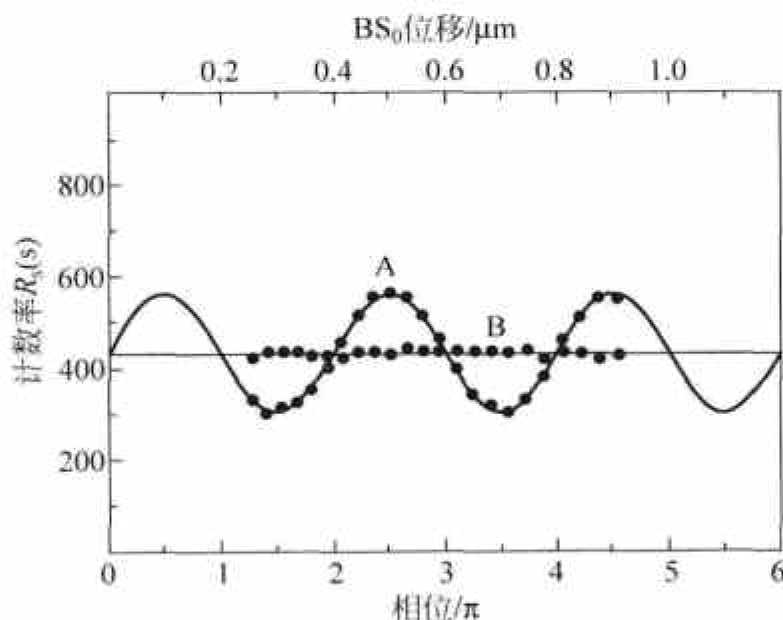


图 1.23　D_1 中的计数率

这个实验再次指明，毁掉相干的原因是潜在的信息，而不必须是实际掌握的信息，只要不把 $|g\rangle$ 和 $|k\rangle$ 准直，式(1.5.17)原有的 $\frac{\eta}{2}\mathrm{i}(T+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi})|l\rangle_1|k\rangle_2$ 就变为 $\frac{\eta}{2}(\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}|l\rangle_1|k\rangle_2+\mathrm{i}T|l\rangle_1|g\rangle_2)$. 再求 D_1D_2 符合，就只有 $\eta^2/4$，不用实际去测 $|g\rangle$ 和 $|k\rangle$，相干就丢了.

1.6　双光子干涉仪量子涂消器

在 1.3 节中讨论了量子涂消器的概念. 真正实现的首先是乔瑞宇研究组的双光子干涉仪[29]，图 1.24 是实验装置的示意图. 氩离子激光器 351.1nm 的泵浦光子在非线性晶体 KDP 中下转换为两个平均值为 702.2nm 的共轭光子，用滤波器限制带宽为 10nm. 两个关联光子通过反射镜同时射到分束器上，两个输出道 D_1，D_2 测量单独计数和两道的符合计数. 图 1.25(a)是简化的干涉仪图，图 1.25(b)是对符合计数有贡献的路径：两个光子在分束器处或者是反射($r\times r$)或都是透射($t\times t$). 当两路程差为 0 时，符合计数是

$$P_c=|r\times r+t\times t|^2=\left|\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\times\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}+\frac{1}{\sqrt{2}}\times\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2=0. \tag{1.6.1}$$

因子 i 来自分束器处反射带来的相位差 $\pi/2$. 当程差比相干长度大得多时 $r\times r$ 和 $t\times t$ 两路不再相干，计数率是二者模仿之和：

$$P_c=\frac{1}{2}. \tag{1.6.2}$$

由于每个光子在分束器处反射与透射几率都是50%,符合计数应占1/2,另外1/2是两个光子进入同一个探测器.实际上在分束器后的波函数是

$$|\psi\rangle_{\Delta x=0} = \frac{1}{2}[|1_1 1_2\rangle + \mathrm{i}^2\,|1_1 1_2\rangle + \mathrm{i}\,|2_1 0_2\rangle + \mathrm{i}\,|0_1 2_2\rangle]$$

$$= \frac{\mathrm{i}}{2}[|2_1 0_2\rangle + |0_1 2_2\rangle]. \tag{1.6.3}$$

Fock态$|nm\rangle$代表向探测器D_1传播的有n个光子,向D_2传播的有m个光子.$\Delta x=0$意为程差为0.如果移动图1.24中的棱镜以调整两个路径的程差δL,则符合计数几率将从0增加,直到程差趋近相干距离,符合计数率趋向1/2并与程差无关,这时干涉消失.

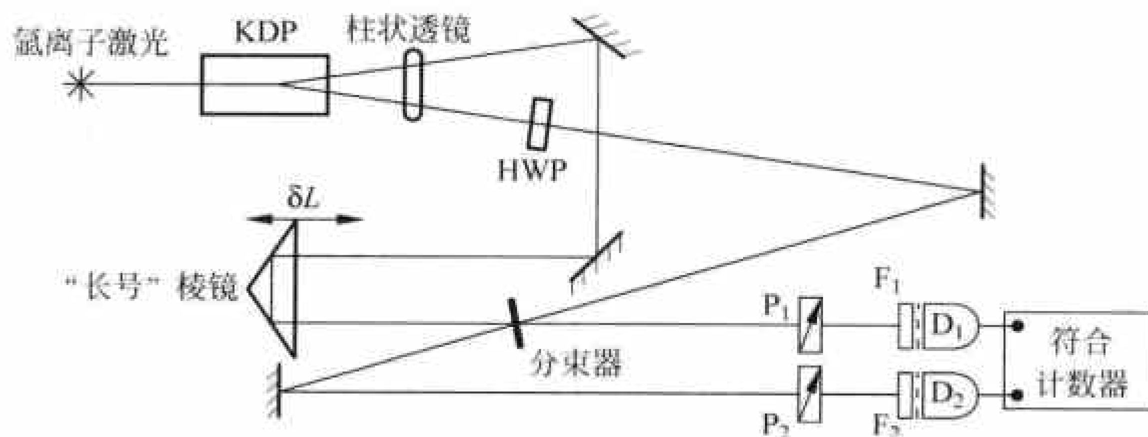


图1.24 观察量子涂消的干涉仪装置示意图

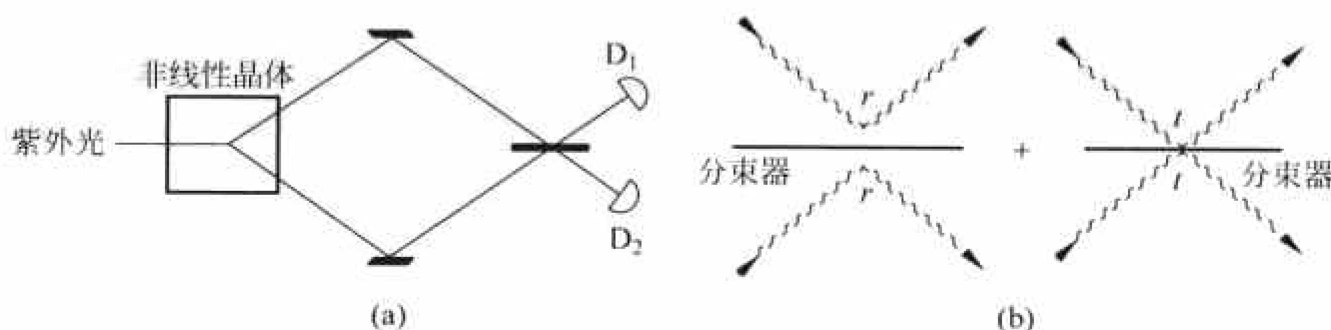


图1.25 干涉仪简图(a)及对符合计数有贡献的路径(b)

从式(1.6.3)可见在程差为0时两个缠绕光子在同一方向离开分束器(去往探测器1或2).这个现象是洪、欧和Mandel[22]最初发现的,此后被称为"光子聚团"(photon coalescence).有趣的是,两个独立的光子也有同样现象.例如在1.5节中提到过的Legero等人[23]的量子拍频实验.两个光子脉冲相继被记录到.第一个光子测量将两个光子缠绕起来,这就决定了第二个光子被任一个探测器接收到的几率.相同频率的光子聚团最为明显.

下转换产生的两个光子都是水平偏振的.如果在一束中放置半波片,其光轴与水平偏振方向成$\phi/2$角(图1.24中的HWP),这个光子的偏振方向就和水平成ϕ角,如$\phi/2=45°$,则偏振就变为垂直方向了.这样偏振就成为一个新的参数,可以用来辨认进入任何一个探测器的光子是从"哪--个路径"来的.可以预料,干涉现象将会消失.令H代表水平偏振,V代表垂直偏振.光子通过半波片偏振变为$\mathrm{H}+\phi$,即偏振与水平成ϕ角:

$$|1^{\mathrm{H}+\phi}\rangle = |1^{\mathrm{H}}\rangle\cos\phi + |1^{\mathrm{V}}\rangle\sin\phi. \tag{1.6.4}$$

放置半波片后在分束器后面的波函数是

$$|\psi\rangle_{\Delta x=0} = \frac{1}{2}[|1_1^H 1_2^{H+\phi}\rangle + i^2 |1_1^{H+\phi} 1_2^H\rangle + i |1_1^{H+\phi} + 1_1^H, 0_2\rangle + i |0_1, 1_2^H + 1_2^{H+\phi}\rangle]. \tag{1.6.5}$$

再用式(1.6.4),在式(1.6.5)中的 $|1_1^H 1_2^H\rangle\cos\phi$ 两项对消,余下的是

$$|\psi\rangle_{\Delta x=0} = \frac{1}{2}[|1_1^H 1_2^V\rangle\sin\phi - |1_1^V 1_2^H\rangle\sin\phi + i |2_1^H 0_2\rangle\cos\phi + i |1_1^V + 1_1^H, 0_2\rangle\sin\phi + i |0_1 2_2^H\rangle\cos\phi + i |0_1 1_2^H + 1_2^V\rangle\sin\phi]. \tag{1.6.6}$$

只有前二项与符合测量有关,因为其他 Fock 态是 $|02\rangle$ 或 $|20\rangle$. 符合测量的结果是

$$P_c = \frac{1}{4}[2\sin^2\phi] = \frac{1}{2}\sin^2\phi. \tag{1.6.7}$$

这个结果是取了式(1.6.6)中 $|1_1^V 1_2^H\rangle$ 和 $|1_1^H 1_2^V\rangle$ 的系数,将它们平方再相加得来的. 这两个状态都是两个探测器中各有 1 个光子. 为什么没有干涉项呢? 原因是这两个状态是正交的——偏振态正交. 这是加了半波片的结果: 它使两个状态正交,因而使干涉为 0,这和提供分辨"从哪条路来"的潜在可能是共生的. 不论你测量与否,结果总是一样的. 在图 1.26(a)中半波片方向的不同导致对干涉的不同效应. 在图 1.26(b)中绘出了作为半波片角度函数的可见度.

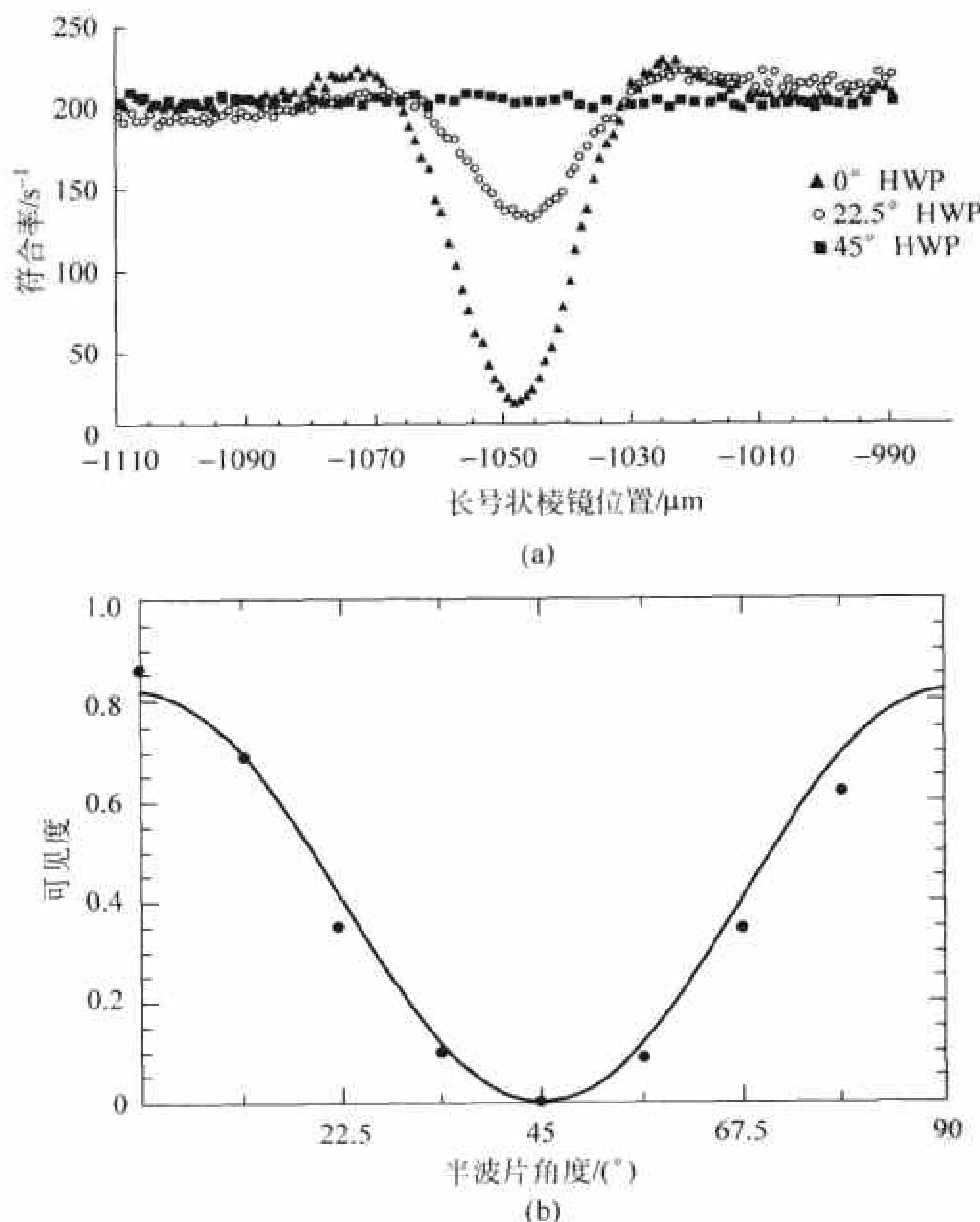


图 1.26

(a) 不同半波片方向下表现干涉的符合计数率急降的轮廓; (b) 作为半波片角度函数的可见度. 取自[29]

进行量子涂消就是反其道而行之.在两个探测器前面各放一个检偏器 P_1 和 P_2，检偏方向分别为 θ_1 和 θ_2.设原来的半波片放置于 $\phi/2=45°$，则式(1.6.6)变为

$$|\psi\rangle_{\Delta x=0}=\frac{1}{2}[-|1_1^V 1_2^H\rangle+|1_1^H 1_2^V\rangle+\cdots]. \tag{1.6.8}$$

检偏器的作用是求出式(1.6.8)态在

$$\langle\theta_1|=\langle 1_1^H|\cos\theta_1+\langle 1_1^V|\sin\theta_1$$

和

$$\langle\theta_2|=\langle 1_2^H|\cos\theta_2+\langle 1_2^V|\sin\theta_2$$

上的投影.结果是

$$\begin{aligned}\langle\theta_1\theta_2|\psi\rangle_{\Delta x=0}&=\frac{1}{2}(\cos\theta_1\sin\theta_2-\sin\theta_1\cos\theta_2)\\&=\frac{1}{2}\sin(\theta_2-\theta_1),\end{aligned}$$

以及

$$P_c(0)=|\langle\theta_1\theta_2|\psi\rangle_{\Delta x=0}|^2=\frac{1}{4}\sin^2(\theta_2-\theta_1).$$

如 $\theta_1=\theta_2$，则 $P_c(0)=0$ 完全恢复了量子干涉的值.如果程差大于相干长度，则式(1.6.8)的两项不再相干，求 P_c 时须将它们分别投影到 $\langle\theta_1\theta_2|$，取模方再相加：

$$\begin{aligned}P_c(x>c\tau)&\approx\left|\frac{1}{2}\langle\theta_1\theta_2\mid 1_1^H 1_2^V\rangle\right|^2+\left|\frac{1}{2}\langle\theta_1\theta_2\mid 1_1^V 1_2^H\rangle\right|^2\\&=\frac{1}{8}\{\sin^2(\theta_2-\theta_1)+\sin^2(\theta_2+\theta_1)\}.\end{aligned} \tag{1.6.9}$$

由于半波片的作用，在 D_1，D_2 两个探测器道都有“哪一条路径”的信息，必须在两个探测器前都放检偏器才能消去信息.另有一个很重要的地方：涂消是在干涉仪的输出口之后进行的，刚刚在两个探测器进行符合测量时恢复了干涉效应.检偏器角度的设置完全决定了这一对共轭光子的表现.理论与实验的比较示于图1.27.图1.27(a)是理论曲线，给出两个检偏器设置角度不同时涂消的结果.图1.27(b)中的点是实验数据，曲线是理论计算修正到可见度91%的结果.远离曲线最低点没有干涉现象，因此方位角无关紧要.在最低点附近光子2极化的非定域塌缩导致正弦曲线公式的变化.棱镜移动由步进压电电机完成，它的位置分辨率是0.13μm.

史砚华等[30]进行了一个推迟选择的量子涂消器实验，选择通过在分束器上的光子随机地作出.原理示于图1.28.标记为A或B的原子由弱激光器激发.激发原子(A或B)通过级联衰变发射一对缠绕光子.向右方传播的光子1由探测器 D_0 记录.D_0 沿 x 轴方向扫描观察干涉条纹.向左方传播的光子2遇到50/50分束器.如光子2是从原子A发射的，它将沿路径A遇到分束器BSA，以50%几率反射或透射.如它是从原子B发射的，就将沿路径B遇到分束器BSB，以50%几率反射或透射.如光子在分束器上透射，它将到达探测器 D_3 或 D_4.由原子级联衰变产生的这对光子是处于缠绕态的：

$$|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}[|1\rangle_A|2\rangle_A+|1\rangle_B|2\rangle_B],$$

在探测器 D_3 或 D_4 记录到光子就能提供光子2的走“哪一条路径”的信息，而光子1的路径也因之成为已知.

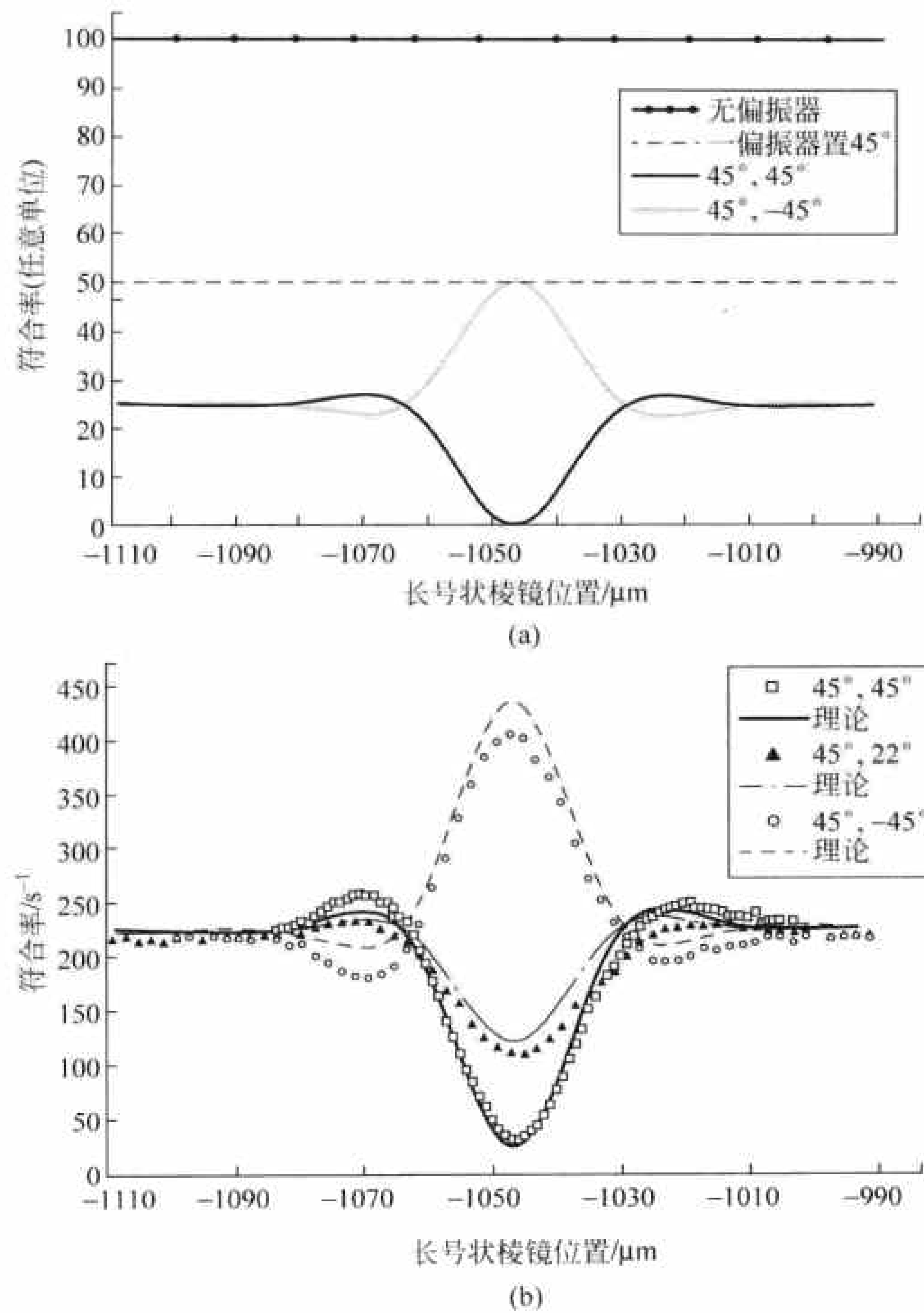


图 1.27 涂消器的理论与实验比较

(a) 检偏器的角度不同设置的涂消结果(理论); (b) 实验数据,理论曲线已调整到可见度 91%

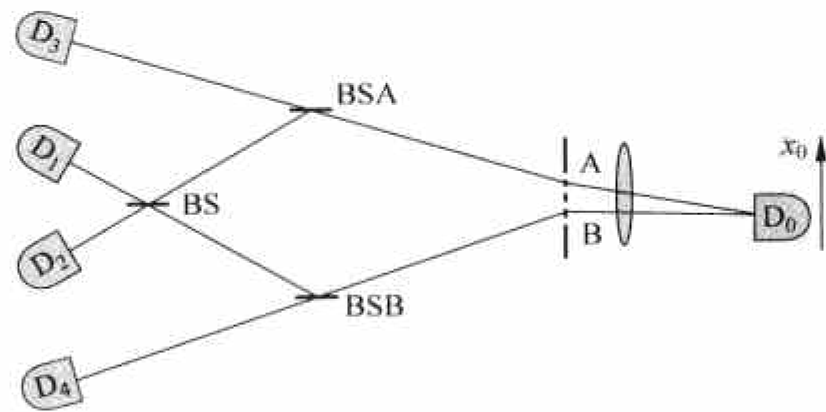


图 1.28 量子涂消器实验. 取自[30]

如在任一个分束器上光子 2 反射,它将遇到另一个 50/50 分束器 BS 而被探测器 D_1 或 D_2 探测到. 由于分束器 BS 的存在,探测器 D_1 或 D_2 的触发涂消了光子 1 走"哪一条路径"的

信息．因此可以通过设计光子的关联安排干涉的消失或恢复．两个光子的状态可以重新表述为

$$|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}[|1\rangle_+|2\rangle_++|1\rangle_-|2\rangle_-],$$

此处

$$|1\rangle_\pm=\frac{1}{\sqrt{2}}[|1\rangle_A\pm|1\rangle_B],\quad |2\rangle_\pm=\frac{1}{\sqrt{2}}[|2\rangle_A\pm|2\rangle_B].$$

这些状态都代表同一个光子两个状态的相干叠加，正是典型的双缝波函数．D_1 或 D_2 记录到光子 2 导致波函数塌缩，显示光子 1 的状态由 $|1\rangle_+$ 或 $|1\rangle_-$ 给出，保持了干涉条纹．

实验设计中原子 A，B 和 D_0 的距离远小于 A，B 和分束器 BSA，BSB 的距离，有无路径信息的选择由光子 2 随机实现．在光子 1 触发探测器 D_0 之后，光子 2 仍然在去往分束器的半途之中．这个推迟选择是上面讨论过的 Wheeler 的主旋律的更强的变奏．D_0 与探测器 D_i $(i=1,2,3,4)$ 中任一个的延迟符合计数率（记为 R_{0i}）保证事件是由一对光子生成的．R_{01} 与 R_{02} 的联合计数率显示 D_0 坐标 x 的函数的干涉图样．这反映了光子 1 的波动性．R_{03} 与 R_{04} 的联合计数率则不显示干涉图样，因为提供了光子 1 走“哪一条路径”的信息．

在实际实验中泵浦激光束通过双缝在 BBO 晶体中形成 A 与 B 两个区域．从 A 或 B 产生一对下转换光子．光子 2 的到达比信号光子 1 迟 7.7ns．图 1.29 给出了实验安排．

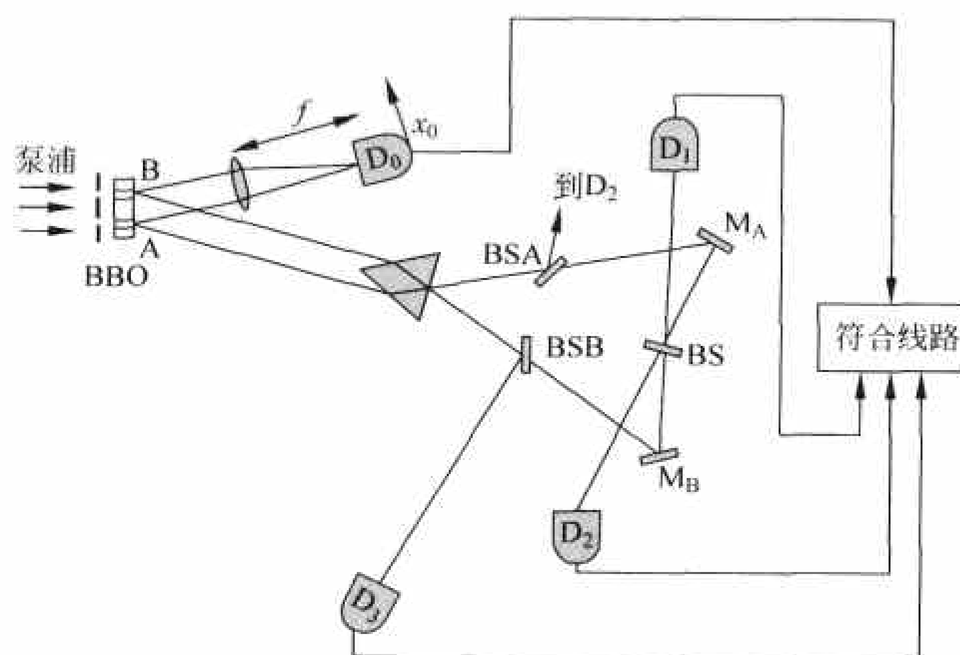


图 1.29　实验安排．取自[30]

在图 1.30 中给出作为 x 函数的 R_{01} 与 R_{02}，观察到标准的杨氏干涉图样．它们是共轭的干涉条纹，相移为 π．它们之和当然是没有结构的常数值（图 1.31）．图 1.32 给出的 R_{03} 不显示干涉．

推迟选择涂消器的概念曾引起过不少争论，因为在过去记录下的光子 1 如何能受光子 2 在未来的行为影响？事实上缠绕态 $|\psi\rangle$ 是决定物理的．究竟是选择第一方案（确定“哪一条路径”）或第二方案（两条路径），是由光子 2 的行为随机选定的．实际上是在实验完成之后把 $D_1\sim D_4$ 各探测器记录的数据分类处理才能把物理的全部内容揭示出来．单独由 D_0 记录的数据（图 1.31）给不出什么信息．

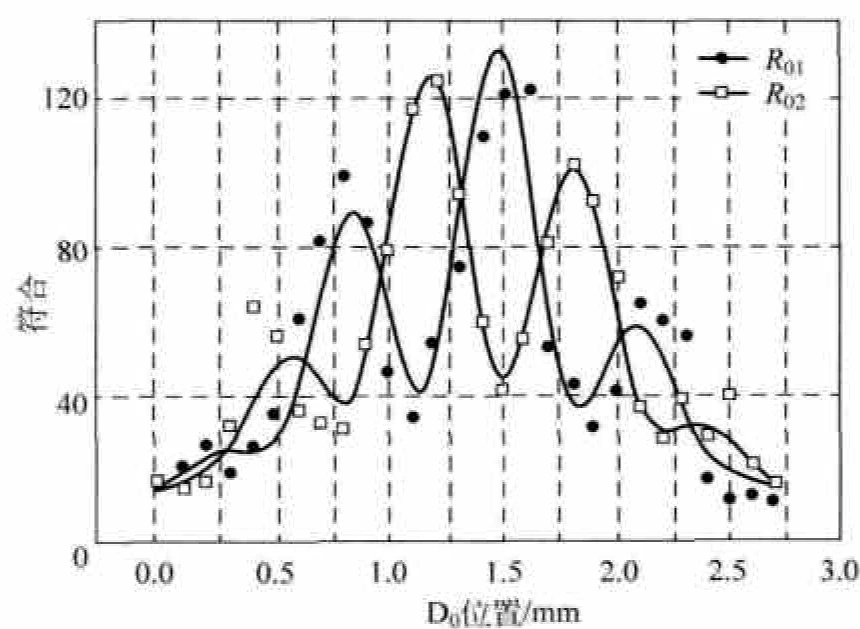


图 1.30 R_{01}与R_{02}的共轭条纹. 取自[30]

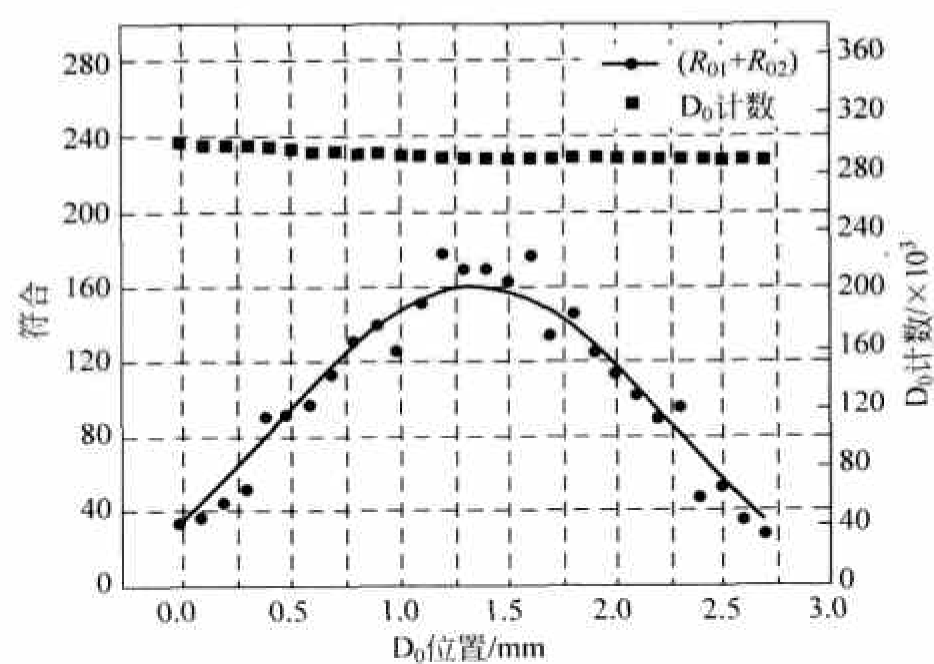


图 1.31 R_{01}与R_{02}之和不呈现干涉. 取自[30]

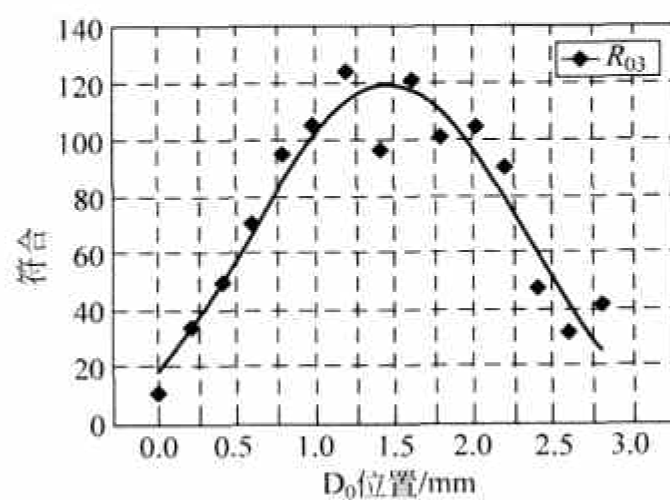


图 1.32 R_{03}不呈现干涉. 取自[30]

1.7 Einstein 和 Bohr 关于量子力学的争论，Bell 定理

20 世纪两位最伟大的物理学家 Einstein 和 Bohr 曾在 1930 年和 1935 年就量子力学进行过两次争论. 1935 年的争论被称为"EPR 佯谬". 关于这个问题的讨论从 1965 年起又成为非常热门的话题，研究工作空前地兴旺起来. 原因是最初的争论仅限于理论概念和"假想实验"，而 Bell 在 1965 年的一篇论文却提出了基于 Einstein 观点的"隐变量理论"可以用实验检验，其判据后来被称为 Bell 不等式. 从 60 年代后期起进行了许多验证不等式的实验. 80 年代所进行的实验已经基本上达到过去只能在理论上讨论的"想象中实验"的水平. 这些理论和实验的发展使人们对量子力学基本问题有了进一步的认识，研究仍在继续.

1.7.1 1930 年 Einstein 对量子力学的批评："量子力学是不自洽的."

1930 年在 Brussels 举行的 Solvay 讨论会上，Einstein 提出一个假想实验. 在一个密闭的盒中有辐射存在，事先测好盒的质量. 由一个预先设计好的钟表机构开启盒上的快门，经短时间 T 后关闭. 在此期间有一个光子逸出. 快门关闭后再测盒的质量，二次测量值之差正好是逸出光子的能量 E. 由于时间 T(由钟表机构测量)和光子能量(由盒的质量变化测量)两种测量是独立的、互不干扰的，测量精确度不互相制约，因而破坏了 $\Delta T \cdot \Delta E \geqslant \hbar$ 的不确定关系，他的结论是"量子力学是不自洽的". 对这个批评 Bohr 一时感到很困惑. 对量子力学不确定原理的正确性，Bohr 是深信不疑的，但一时又找不到 Einstein 论据的错误. 经过一夜苦思，第二天 Bohr 在黑板上画了这个假想的实验装置(图 1.33). Bohr 指出，必须对测量过程做认真分析，才能找出时间和能量测量精确度之间的关系. 在光子逸出时(时间测量)盒子获得一个向上的动量

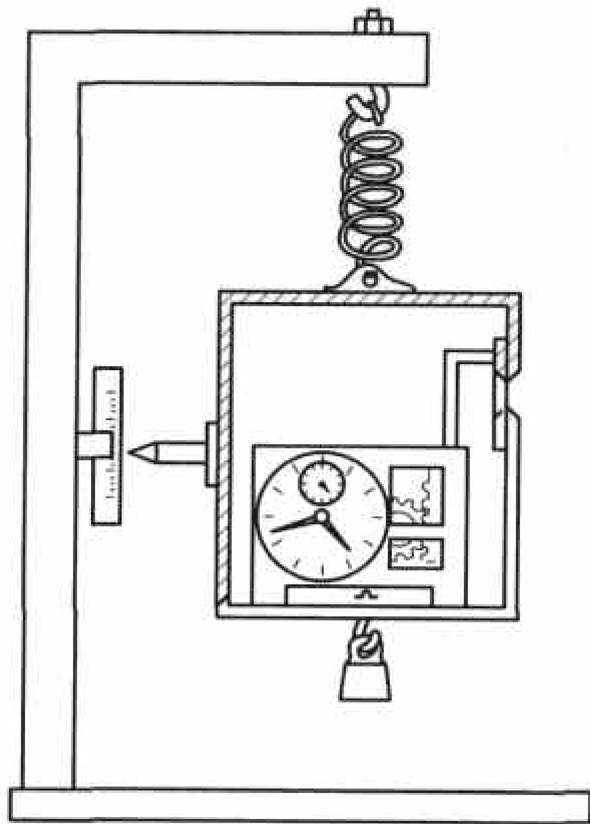


图 1.33 Einstein 之盒

$$p \leqslant T \frac{E}{c^2} g, \tag{1.7.1}$$

此处 g 为重力加速度，而动量的不确定值为

$$\Delta p \leqslant T \frac{\Delta E}{c^2} g. \tag{1.7.2}$$

盒的两次平衡位置之差 Δx 是和 Δp 有关的：

$$\Delta p \geqslant \frac{\hbar}{\Delta x}. \tag{1.7.3}$$

因此，

$$\hbar \leqslant T \frac{\Delta E}{c^2} \Delta x g. \tag{1.7.4}$$

T 的测量不确定值是由于位置不确定值 Δx 引起的引力势不同从而影响钟表快慢所致. 据引力红移公式

$$\frac{\Delta T}{T} = \frac{g\Delta x}{c^2}, \tag{1.7.5}$$

将式(1.7.5)代入式(1.7.4)即得出

$$\Delta E \Delta T \geqslant \hbar. \tag{1.7.6}$$

Bohr 用 Einstein 自己提出的引力红移回敬了他，说明量子力学是自洽的. 从此 Einstein 没有再提自洽性的问题.

1.7.2 Einstein-Podolsky-Rosen 佯谬："量子力学描述是不完备的."

1933 年 Einstein 等三人提出了对量子力学新的批评[31]，文献中将此称为 EPR 佯谬. EPR 在分析量子力学理论是否完备时，考察了一个由两个粒子组成的一维系统，并提出了用于判断这个问题的三个前提：①任何两个互不接触并不可能直接作用的系统，对其中任何一个系统的测量，量子力学的预言是正确的. ②要是对于一个系统没有干扰，我们能够确定地预测(即几率等于 1)一个物理量的值，那么对应于这一物理量，必定存在着一个物理实在的元素. ③对于任何两个分开的系统，对其中一个系统做的任何物理操作不应立刻对另一个系统有任何影响，也可以说自然界没有超距作用. 这就是历史上有名的 Einstein 可分隔原则. 现在考虑由两个粒子组成的一维系统. 显然，粒子 1 的 x_1 和 p_1，粒子 2 的 x_2 和 p_2 互不对易. 但是我们发现 $x_1 - x_2$ 和 $p_1 + p_2$ 这两个算符是互相对易的，由此可以找到一个态函数，它同时是算符 $x_1 - x_2$ 的本征值为 a 和算符 $p_1 + p_2$ 的本征值为 0 的本征函数，即$\delta(x_1 - x_2 - a)$. 如果我们测得粒子 1 坐标 x_1 为 x，由此可以确定粒子 2 坐标 x_2 必为 $x-a$. 另一方面，我们测得粒子 1 的动量 p_1 为 p，由此可以确定粒子 2 动量 p_2 必为 $-p$. 设 a 为足够大，因此对粒子 1 的任何物理操作，并不对粒子 2 引起任何干扰. 按照上述三个前提之②，可断定对应于 x_1, p_1, x_2, p_2 存在着 4 个独立的物理实在的元素. 而量子力学则指出，x_1 与 p_1，x_2 与 p_2 是不对易的，因此两对量各自只有一个独立的物理实在的元素与其对应. 所以整个系统只能有两个独立的物理实在的元素与其对应. EPR 由此断言，量子力学理论的描述是不完备的. 为了使所讨论的问题与实验更接近，我们介绍另一个版本的 EPR 佯谬，即 D. Bohm 版本的 EPR 佯谬[32]，并就此进行详细分析.

Bohm 版本的 EPR 佯谬将 EPR 原来的系统中两个粒子的坐标和动量改换为三个自旋分量来考虑. 设由两个自旋为 1/2 的粒子组成一个系统，处于总自旋为 0 的状态(单态). 其自旋波函数为

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_\uparrow(1) \times u_\downarrow(2) - u_\downarrow(1) \times u_\uparrow(2)], \tag{1.7.7}$$

式中 $u_\uparrow, u_\downarrow$ 分别代表自旋分量为 1/2 及 $-1/2$ 的旋量波函数. 自旋量子化轴$\hat{n}$的方向是任意的. 由于该系统处于单态，意味着两个粒子处于自旋反平行的状态. 设两个粒子相距甚远，由式(1.7.7)可知，我们测量粒子 1 自旋 x 分量的结果是 1/2 或 $-1/2$，概率各占一半. 同时由式(1.7.7)可以判断，若粒子 1 的自旋 x 分量的测量值为 1/2，与此相应，粒子 2 的自旋 x 分量必然是 $-1/2$；若粒子 1 的自旋 x 分量的测量值为 $-1/2$，与此相应，粒子 2 的自旋 x 分量必然是 1/2. 因此，一个观测者可以不干扰粒子 2，就能确定地预言它的自旋的 x 分量. 根据

同样的操作，观测者可以不干扰粒子2，就能确定地预言它的自旋的 y 分量和 z 分量.

对此，我们按照EPR前提来分析，根据前提②，由于我们测量 $S_x(1)$，或 $S_y(1)$，或 $S_z(1)$，可以不对粒子2作任何干扰（前提③：没有超距作用），就能确切地预言 $S_x(2)$，或 $S_y(2)$，或 $S_z(2)$. 根据前提②可以得出结论，与粒子2的 $S_x(2)$，$S_y(2)$，$S_z(2)$ 相对应存在三个独立的物理实在的元素. 但是，根据量子力学的原则，$S_x(2)$，$S_y(2)$，$S_z(2)$ 互不对易，因此，不可能具有与之相对应的三个独立的物理实在的元素，而只能有一个物理实在的元素. 如果由EPR三个前提分析，可以得出结论，量子力学理论的描述是不完备的.

三条前提中，第②条是有问题的. 这条前提中有"我们能够确定的预测"提法. 要想确定地预测 $S_x(2)$，就必须安排实验测定 $S_x(1)$. 此时我们就不能预测 $S_y(2)$ 和 $S_z(2)$. Bohr在对EPR挑战的回答[33]中指出："对粒子1的测量正是影响了对确定体系未来行为所做出的预言类型的条件."这句话的意思是：对粒子1做 $S_x(1)$ 测量，就确定下来对粒子2未来行为做出预言的类型，即 $S_x(2)$，而不能是 $S_y(2)$ 或 $S_z(2)$. 由于决定自旋三个分量的安排是互相排斥的，因此只能确切预言粒子2的一个自旋分量，而不是三个，结论是不存在量子力学描述不完备的问题.

值得注意的是在前提②中有"不对系统做任何干扰"的提法. 在量子力学早期的文献或教科书中常把物理量 A 与 B 不能同时具有确定值归结为测量 A 时干扰了粒子，影响了确定 B 的值. 因此EPR强调的是既然没有干扰粒子2，那么它所有的物理量都有确定值. Heisenberg和Einstein讨论他的量子力学矩阵表述时说，只有可观测量才能进入理论. Einstein[34]说："哪些量是可观测量不应是我们的选择，而应由理论给出，由理论向我们提示."自旋的三个分量能否同时都存在相应的物理实在元素，不能人为地把经典力学搬到微观体系来认定，而是经过实验来考验量子力学理论的结果. 在认定自旋的三个分量存在着相应的物理实在的元素这类问题上，Einstein并未遵守他自己做出的正确判断. L. Rosenfeld评论[34]："这是一个很聪明的见解，或许Einstein自己应该记住的."

在两个粒子相距很远时，对一个粒子的不同测量结果立即可以预言另一个粒子的不同性质. 这是由于角动量守恒通过波函数产生关联而产生的. 对一个粒子进行测量，就从系统波函数中析出相关的部分（波函数编缩），其中包含了另一个粒子的信息，并非对一个粒子进行的测量能对另一个粒子传递什么信息. 果真如此，倒真是超距作用了，EPR的第三条前提就是为此提出的. 本章1.9节的推迟选择实验结果证明了在进行测量中不存在传递信息的问题. 在2.2.2节讨论了纠缠态Schmidt分解后还会进一步分析，对一个粒子进行测量没有信息传递给第二个粒子.

出于对量子力学关联（缠绕态）的描述不能接受，认为对第二个粒子信息的获得是一种物理上作用的结果，Einstein把这种实际上不存在的作用称为"鬼怪式"(spooklike)的超距作用. "定域相互作用"在经典场论和量子场论中是被物理学家所广泛接受的. 但Einstein提出"可分隔原则"反对超距作用实际上是否定通过叠加原理建立的量子力学关联，而这正是量子力学的重要特征. EPR提出的问题实际上不是佯谬，而是对建立一种新的理论的建议. 他们的挑战引出了大量的"隐变量理论"研究，这类理论认为量子力学描述是不完备的. 在标明系统状态的力学变量（它们都具有确定值）中，有一些在量子力学中是不出现的，它们被称为"隐变量"[35]. 例如量子力学标明自旋状态，可以用 S^2 和 S_z，这里 S_x，S_y 就是隐变量. 量子力学中对隐变量的测量值实际上是对一定系综的统计平均值. 隐变量理论可以分成两类，一

类企图重现量子力学的所有可观测结论，这时一些力学量会具有很奇特的性质，或需要引入很奇特的相互作用；另一类从一些基本原则出发(即 EPR 的三项前提)，在一些简单情况下能重现量子力学结果，但在有些情况下会得出不同于量子力学的结论. 这些理论可以通过实验判明，是更引人注意的. 在文献中称这类理论为定域的(前提③)和实在性的(前提②)隐变量理论，或定域的、决定论的理论. 对 EPR 的挑战，多数物理学家持 Bohr 的观点，因此，长时间以来这个问题是物理学家谈论的话题，但并未进入物理学研究的主流. 这种情况在 1965 年发生了变化，起决定作用的是 J. S. Bell 的研究工作.

1.7.3 Bell 定理

隐变量理论能否和量子力学中力学量的对易关系相协调？有过许多讨论. J. S. Bell 在 1965 年提出一个定理，现被称为 Bell 定理[36]①：要构造一个定域的、决定论的隐变量理论且能和所有的量子力学预言相符是不可能的. Bell 是就 EPR 佯谬的 Bohm 版本进行分析的. 证明如下：令 $A_{\hat{a}}$ 及 $B_{\hat{b}}$ 分别代表粒子 1 在 $\hat{\boldsymbol{a}}$ 方向自旋分量和粒子 2 在 $\hat{\boldsymbol{b}}$ 方向自旋分量的测量结果，以 $\hbar/2$ 为单位，$\hat{\boldsymbol{a}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{b}}$ 是任意两个单位矢量. 考虑 $A_{\hat{a}}$ 和 $B_{\hat{b}}$ 的乘积. 根据量子力学，它是厄密算符 $E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{b}})=\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\hat{\boldsymbol{a}}\,\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\hat{\boldsymbol{b}}$ 对波函数(式(1.7.7))的平均值，即

$$A_{\hat{a}}B_{\hat{b}}=[E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{b}})]_\psi=\langle\psi\mid\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\hat{\boldsymbol{a}}\ \boldsymbol{\sigma}_2\cdot\hat{\boldsymbol{b}}\mid\psi\rangle$$
$$=-\hat{\boldsymbol{a}}\cdot\hat{\boldsymbol{b}}. \tag{1.7.8}$$

特例 $\hat{\boldsymbol{a}}=\hat{\boldsymbol{b}}$ 给出

$$[E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{a}})]_\psi=-1. \tag{1.7.9}$$

Bohm 版本讨论的就是这个特例. 是否量子力学结果(式(1.7.8))可以从定域决定论理论对隐变量作统计平均得到呢？从隐变量理论的观点看，可观测量都具有确定值. 量子力学给出测量结果会有几率分布，这是因为测量的体系是处在不同状态，它们之间由一隐变量区别. 量子力学对此一无所知，由于其描述不完全才给出几率分布. 隐变量理论认为，量子力学中的一个状态，其实是一个包含大量同样体系的系综，体系的自旋状态由 λ 标定. 状态 λ 张成空间 Λ，状态的分布函数是 $\rho(\lambda)$，归一条件是

$$\int_\Lambda\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda=1. \tag{1.7.10}$$

理论是定域的，没有超距作用，因此对粒子 1 的测量结果仅依赖于 λ，$\hat{\boldsymbol{a}}$，而和 $\hat{\boldsymbol{b}}$ 无关. 同理，对粒子 2 的测量与 $\hat{\boldsymbol{a}}$ 无关. 因此对任意 $\hat{\boldsymbol{a}}$，$\hat{\boldsymbol{b}}$ 和 $\lambda\in\Lambda$，下式成立：

$$(A_{\hat{a}}B_{\hat{b}})(\lambda)=A_{\hat{a}}(\lambda)B_{\hat{b}}(\lambda). \tag{1.7.11}$$

对任意的 λ，力学量都有确定值. 对系综作统计平均，得

$$E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{b}})=\int_\Lambda A_{\hat{a}}(\lambda)B_{\hat{b}}(\lambda)\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda. \tag{1.7.12}$$

在下文中，$E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{b}})$ 代表隐变量理论值，$[E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{b}})]_\psi$ 代表量子力学值. Bell 证明在定域性要求(式(1.7.11))下重现量子力学结果式(1.7.9)将导致 $E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{b}})$ 满足一个不等式. 因 $E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{a}})=$

---

① 有关 Bell 定理在 1978 年 2 月以前的理论与实验进展总结在 J. F. Clauser 与 A. Shimony 的评述文章[37]中.

-1，式(1.7.11)给出

$$A_{\hat{a}}(\lambda)=-B_{\hat{a}}(\lambda). \tag{1.7.13}$$

令$\hat{c}$为另一单位矢量，则有

$$\begin{aligned}E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{b}})-E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{c}})&=\int_{\Lambda}[A_{\hat{a}}(\lambda)B_{\hat{b}}(\lambda)-A_{\hat{a}}(\lambda)B_{\hat{c}}(\lambda)]\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda\\&=\int_{\Lambda}A_{\hat{a}}(\lambda)B_{\hat{b}}(\lambda)[1-A_{\hat{b}}(\lambda)A_{\hat{c}}(\lambda)]\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda\end{aligned} \tag{1.7.14}$$

此处用了式(1.7.13)以及$A_{\hat{b}}(\lambda)=\pm1$导致的$A_{\hat{b}}(\lambda)A_{\hat{b}}(\lambda)=1$的结果. 在式(1.7.14)中，因子$A_{\hat{a}}(\lambda)B_{\hat{b}}(\lambda)$对不同的$\lambda$可以是$+1$或$-1$，这个因子对积分起了部分抵消的作用，因此

$$|E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{b}})-E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{c}})|\leqslant\int_{\Lambda}[1-A_{\hat{b}}(\lambda)A_{\hat{c}}(\lambda)]\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda.$$

再用$A_{\hat{c}}(\lambda)=-B_{\hat{c}}(\lambda)$就得到

$$|E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{b}})-E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{c}})|\leqslant1+E(\hat{\boldsymbol{b}},\hat{\boldsymbol{c}}). \tag{1.7.15}$$

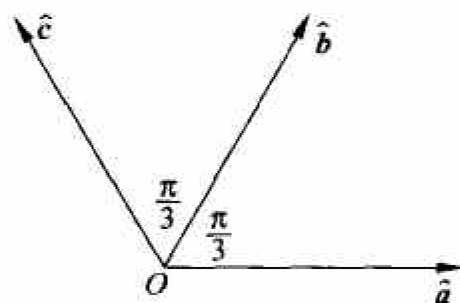


图1.34　一种$\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{b}},\hat{\boldsymbol{c}}$的选择，三个矢量共面

这是一个Bell不等式. 经过$\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{b}},\hat{\boldsymbol{c}}$的巧妙选择，可以使不等式(1.7.15)和量子力学结果不同. 如图1.34中的选择，量子力学结果是

$$|[E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{b}})]_{\psi}-[E(\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{c}})]_{\psi}|=|-\hat{\boldsymbol{a}}\cdot\hat{\boldsymbol{b}}+\hat{\boldsymbol{a}}\cdot\hat{\boldsymbol{c}}|=1,$$

但$1+[E(\hat{\boldsymbol{b}},\hat{\boldsymbol{c}})]_{\psi}=1/2$，明显地破坏了不等式(1.7.15). 通过这个反证证明了Bell定理. Bell定理的重要，在于它的普遍性. Bell不是研究某一种隐变量理论而指出其错误，而是证明Einstein的定域性及实在性前提在一系列情况下会和量子力学的结论矛盾.

1.7.4　推广到现实系统的Bell不等式

以上Bell定理的证明指出了决定论的定域隐变量理论在一定情况下给出和量子力学不同的结果. 证明是对理想体系进行的，但要用于和实验比较，面对的是实在系统，证明中所用的部分条件不再成立. 探测器效率总是小于1，设定$\hat{\boldsymbol{a}}$和$\hat{\boldsymbol{b}}$的偏振分析器会有衰减，因此会发生以下4种情况：①两个粒子都被探测到；②粒子1被探测到，粒子2丢失；③粒子2被探测到，粒子1丢失；④两个粒子都丢失. 如果只用第一种情况代表系综去和理论比较，就必须假设总系综分为4个亚系综的相对比例与$\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{b}}$无关. 但实验装置和测量过程不能保证这一点，因此必须把4种情况都包括进来，此时总系综分布函数$\rho(\lambda)$与$\hat{\boldsymbol{a}},\hat{\boldsymbol{b}}$无关. Bell 1971年的证明[38]考虑了这一点，而且将理论推广到可以包括随机变量或甚至随机理论，但保持定域性和“实在性”条件. 每一个测量会有3种结果：$+1$代表自旋向上，-1代表自旋向下，0代表粒子丢失. 即有

$$A_{\hat{a}}(\lambda)=\begin{cases}+1,\\ \ \ 0,\\-1;\end{cases}\quad B_{\hat{b}}(\lambda)=\begin{cases}+1,\\ \ \ 0,\\-1.\end{cases} \tag{1.7.16}$$

对给定状态λ，以$\overline{A_{\hat{a}}}(\lambda)$和$\overline{B_{\hat{b}}}(\lambda)$表示这两个量的期望值. 由于粒子可能丢失，以及理论可以包含随意变量，因而

$$|\overline{A_{\hat{a}}}(\lambda)|\leqslant1,\quad|\overline{B_{\hat{b}}}(\lambda)|\leqslant1. \tag{1.7.17}$$

定域性要求给出

$$E(\hat{a},\hat{b}) = \int \overline{A_{\hat{a}}}(\lambda)\ \overline{B_{\hat{b}}}(\lambda)\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda, \tag{1.7.18}$$

此处 $\rho(\lambda)$ 与 $\hat{a},\hat{b}$ 无关. 令 $\hat{a}',\hat{b}'$ 代表对粒子 1 及 2 自旋测量另外的取向. 由式(1.7.18)可得

$$\begin{aligned}E(\hat{a},\hat{b}) - E(\hat{a},\hat{b}') &= \int_\Lambda \overline{A_{\hat{a}}}(\lambda)\ \overline{B_{\hat{b}}}(\lambda)[1 \pm \overline{A_{\hat{a}'}}(\lambda)\ \overline{B_{\hat{b}'}}(\lambda)]\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda \\ &\quad - \int_\Lambda \overline{A_{\hat{a}}}(\lambda)\ \overline{B_{\hat{b}'}}(\lambda)[1 \pm \overline{A_{\hat{a}'}}(\lambda)\ \overline{B_{\hat{b}}}(\lambda)]\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda,\end{aligned}$$

在上式右方方括弧内±两项是加进去的,因为它们与方括弧前因子相乘之后结果正好抵消. 再用式(1.7.17)得到

$$\begin{aligned}|E(\hat{a},\hat{b}) - E(\hat{a},\hat{b}')| &\leqslant \int_\Lambda [1 \pm \overline{A_{\hat{a}'}}(\lambda)\ \overline{B_{\hat{b}'}}(\lambda)]\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda \\ &\quad + \int_\Lambda [1 \pm \overline{A_{\hat{a}'}}(\lambda)\ \overline{B_{\hat{b}}}(\lambda)]\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda \\ &= 2 \pm [E(\hat{a}',\hat{b}') + E(\hat{a}',\boldsymbol{b})],\end{aligned}$$

因此有①

$$-2 \leqslant E(\hat{a},\hat{b}) - E(\hat{a},\hat{b}') + E(\hat{a}',\hat{b}) + E(\hat{a}',\hat{b}') \leqslant 2. \tag{1.7.19}$$

重新定 $\hat{a},\hat{b},\hat{a}',\hat{b}'$,可将式中负号移至任一项之前. 式(1.7.19)代表了另一类 Bell 不等式.

量子力学给出

$$[E(\hat{a},\hat{b})]_\psi = -C\hat{a}\cdot\hat{b}. \tag{1.7.20}$$

由于实际条件,关联不如理想情况完全,这里引入一个正实数 $C\leqslant 1$,仅对理想系统 $C=1$. 取 $\hat{a},\hat{b},\hat{a}',\hat{b}'$ 如图 1.35 所示,便可使量子力学结果破坏 Bell 不等式. 图 1.35 两种几何条件给出

$$[E(\hat{a},\hat{b}) - E(\hat{a},\hat{b}') + E(\hat{a}',\hat{b}) + E(\hat{a}',\hat{b}')]_\psi = \pm 2\sqrt{2}C. \tag{1.7.21}$$

和式(1.7.19)相比看出,在 C 值相当宽的范围内 Bell 不等式被破坏. 从图 1.36 看出式(1.7.21)左方的实验值落在 2 到 $2\sqrt{2}$ 以及 -2 到 $-2\sqrt{2}$ 之间(图中波浪线范围),则说明隐变量理论不能重现量子力学的结果. 如实验值落在 ±2 之间,则不能做出明确结论,因为这可能由于测量装置的缺陷使 C 值过小所致.

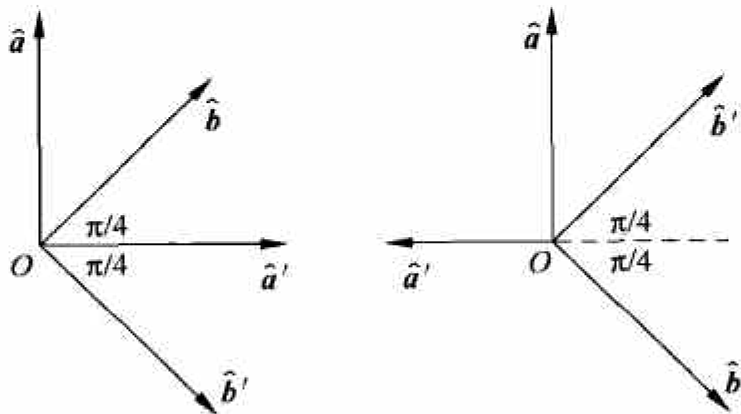


图 1.35 两种 $\hat{a},\hat{b},\hat{a}',\hat{b}'$ 的选择,4 个矢量共面



图 1.36 量子力学和隐变量理论比较

① 这类不等式此后被称为 CHSH(Clauser-Horne-Shimony-Holt)不等式.

Bell 不等式的检验要回答的是能否用定域决定论隐变量理论重现量子力学结果的问题. 如果一系列实验证实不等式被破坏，结论就是隐变量理论不能正确描述微观物理世界.

1.8 Bell 不等式的实验验证

从以上分析看出，在一定的实验范围内不能区别隐变量理论和量子力学，必须寻找实验的敏感区域(例如图 1.35 的几何)，也还需要比较好的分析探测设备.

初期实验曾考虑过角动量为 0 的正电子素湮没产生的两个光子的自旋关联. 但对能量如此大的光子(0.51Mev)找不到有效的偏振分析器，因此只能通过间接测量，即测光子产生的 Compton 效应截面来测光子自旋，因其中一项与偏振有关. 实验结果最初不一致. 但后来逐步趋向一致：Bell 不等式不能被满足. 这类结果因利用间接推断而有争议.

有明确说服力的实验是利用原子级联辐射跃迁，选择光子总角动量为 0 的情况，且光子能量较小，偏振分析效率高. 这类工作始于 1969 年 Clauser，Horne，Shimony 和 Holt 的实验[39]，随后也有其他研究者做了类似实验. 图 1.37 给出实验装置的示意图，源发出两个光子 γ_1，γ_2 两个偏振分析器置于偏振方向$\hat{a}$及$\hat{b}$. 测量$\hat{a}$与$\hat{b}$夹角为 θ 时两个探测器的符合计数率，它代表两个光子的角动量关联. 对此，隐变量理论和量子力学给出不同的结果. 选择原子级联跃迁

$$J=0\xrightarrow{\gamma_1}J=1\xrightarrow{\gamma_2}J=0,$$

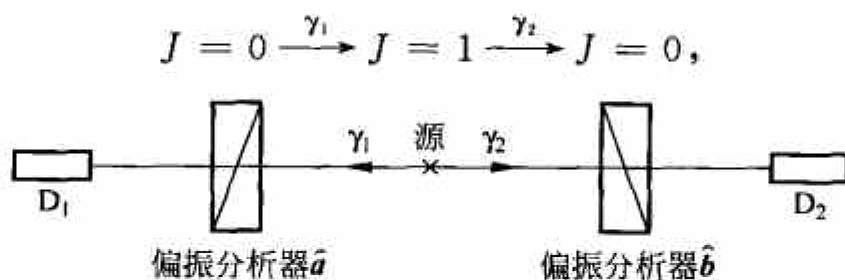


图 1.37　光子自旋关联实验装置示意图

J 为原子能级角动量. 由于始末态角动量相同，两个光子角动量总和为 0. 令 $R(\theta)$代表两个偏振分析器$\hat{a}$与$\hat{b}$夹解为 θ 时两个探测器的符合计数率. Clauser，Shimony 等给出在理想情况下隐变量理论的结果是[39]

$$\left|\frac{R(\pi/8)}{R_0}-\frac{R(3\pi/8)}{R_0}\right|_{\mathrm{HVT}}\leqslant\frac{1}{4},$$

此处 HVT 是隐变量理论的缩写，R_0 为无偏振器时的符合计数率. 量子力学结果是

$$\left|\frac{R(\pi/8)}{R_0}-\frac{R(3\pi/8)}{R_0}\right|_{\varphi}=\frac{1}{4}\sqrt{2},$$

量子力学结果不满足 Bell 不等式.

令 $R\equiv\dfrac{R(\pi/8)}{R_0}-\dfrac{R(3\pi/8)}{R_0}$，实测的结果如下：

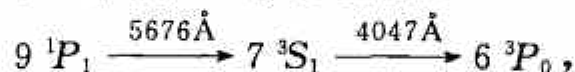
(1) Freeman 和 Clauser1972 年[40]采用 Ca 级联辐射



$$4p^2\ {}^1S_0\xrightarrow{5513\text{Å}}4p4s\ {}^1P_1\xrightarrow{4227\text{Å}}4s^2\ {}^1S_0$$

测得 $R=0.300\pm0.008$，破坏 Bell 不等式.

(2) Holt 和 Pipkin1973 年[41]采用^{198}Hg 级联辐射



$$9\ {}^1P_1\xrightarrow{5676\text{Å}}7\ {}^3S_1\xrightarrow{4047\text{Å}}6\ {}^3P_0,$$

这是 $J=1\to J=1\to J=0$ 级联，量子力学公式需作改变[35]，结果是 $R=0.216\pm0.013$，与 Bell 不等式相容. 但批评者认为他们用的装有电子枪和汞蒸气的硬玻璃器壁应力带来系统误差，他们的结果不能重复.

(3) Clauser 1976 年[42]重复进行 Holt 和 Pipkin 实验，结果是 $R=0.2885\pm0.0093$，破坏 Bell 不等式.

(4) Fry 和 Thompson 1976 年[43]采用^{200}Hg 级联辐射



$$7\,^3S_1 \xrightarrow{4358\text{Å}} 6\,^3P_1 \xrightarrow{2537\text{Å}} 6\,^1S_0$$

结果是 $R=0.296\pm0.014$，破坏 Bell 不等式.

Clauser 和 Shimony 的评述文章[37]介绍了 1978 年以前许多实验. 结果已经相当有说服力地证实 Bell 不等式被破坏. 以上讨论的光子自旋关联是采用“单通道”偏振分析器进行的，即平等偏振记录为 1，垂直偏振不记录. 对此有的批评认为是“不完全测量”，有一定争议.

到 80 年代实验更加改善，结果更加有说服力，甚至接近了理想情况. 1981 年 A. Aspect[44]仍选 Ca 的级联辐射(图 1.38)，用双光子激发(Kr 离子激光器和可调染料激光器)，将 Ca 原子激发到$^1S_0$. Ca 原子退激发出两个光子，角动量和为 0. 测它们的自旋关联 $R(\theta)/R_0$. 由于采用激光激发，光源尺寸很小(0.5mm×0.05mm×0.05mm)，对探测道几何极为有利. 加上其他控制条件，在几小时实验时间内漂移、涨落都小于 1%. 单通道分析结果示于图 1.39. 图中量子力学结果已考虑了分析器立体角及探测效率，可见实验与量子力学符合极好. Bell 不等式被破坏，与实验值相差 9 倍标准偏差. Aspect 研究组还进行了双通道分析器实验，装置如图 1.40(a)所示. 分析器采用了偏振块，平行偏振光子得以直接通过，而垂直偏振光子则被反射偏转 90°，两种偏振的光子都可以通过光电倍增管(PM)被记录. 通过符合线路可以得到 $N_{++}(\hat{a},\hat{b})$，$N_{--}(\hat{a},\hat{b})$，$N_{+-}(\hat{a},\hat{b})$，$N_{-+}(\hat{a},\hat{b})$，此处 $N_{+-}(\hat{a},\hat{b})$代表一个光子平行于$\hat{a}$(以+表示)，另一个光子垂直于$\hat{b}$(以−表示)，余类推. 用这些量可以计算出

$$E(\hat{a},\hat{b})=\frac{N_{++}(\hat{a},\hat{b})+N_{--}(\hat{a},\hat{b})-N_{+-}(\hat{a},\hat{b})-N_{-+}(\hat{a},\hat{b})}{N_{++}(\hat{a},\hat{b})+N_{--}(\hat{a},\hat{b})+N_{+-}(\hat{a},\hat{b})+N_{-+}(\hat{a},\hat{b})}. \tag{1.8.1}$$

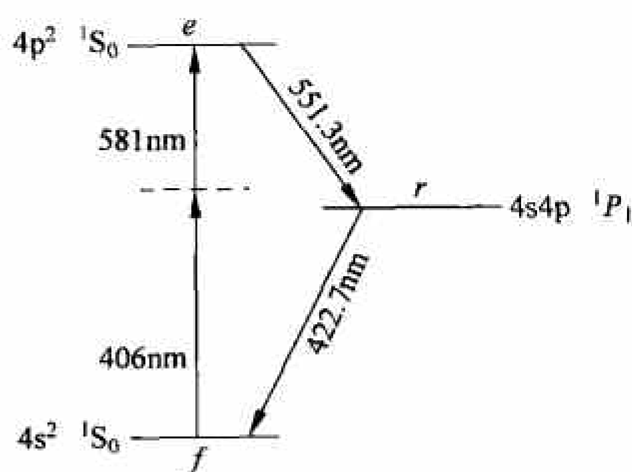


图 1.38 Ca 原子级联辐射

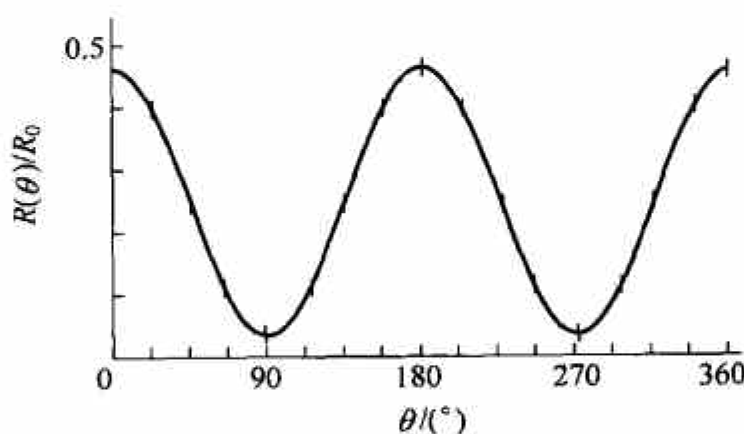
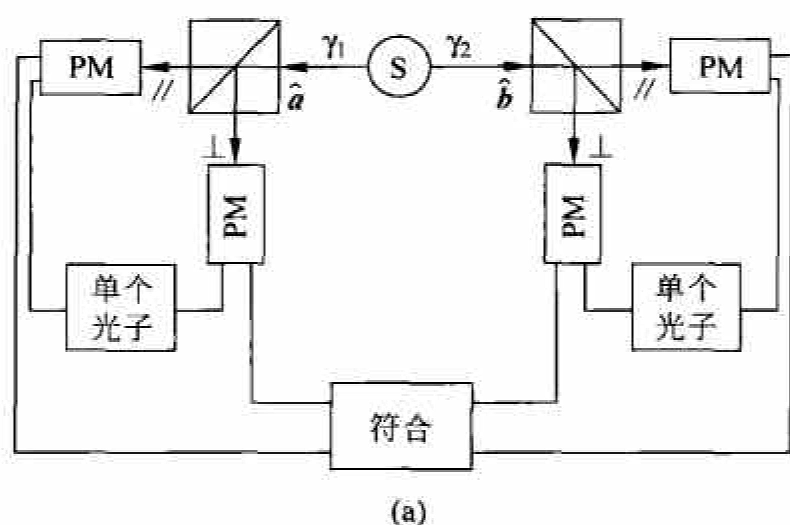


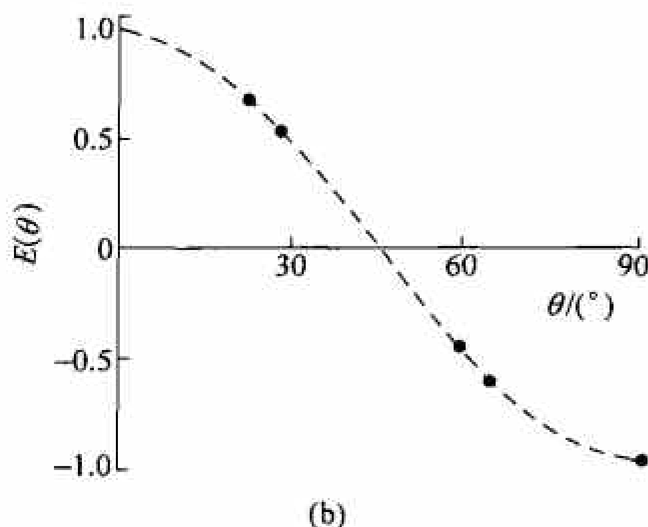
图 1.39 单通道分析器实验结果

实验结果示于图 1.40(b)，$E(\theta)$代表$\hat{a}$与$\hat{b}$夹角为 θ 时的 $E(\hat{a},\hat{b})$值，可见实验装置很接近理想：$\theta=0$ 时 $E(0)$很接近于 1. 令

$$S=E(\hat{a},\hat{b})-E(\hat{a},\hat{b}')+E(\hat{a}',\hat{b})+E(\hat{a}',\hat{b}'). \tag{1.8.2}$$



(a)



(b)

图 1.40 双通道分析实验装置(a)及实验结果(b)

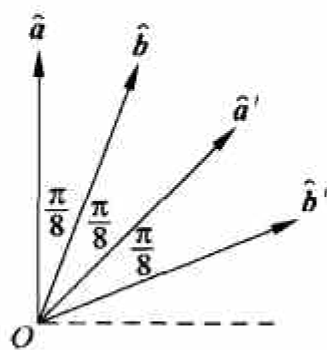


图 1.41 $\hat{a},\hat{b},\hat{a}',\hat{b}'$ 选择

对如图 1.41 的安排，理想情况下量子力学结果是

$$S_{QM}=2\sqrt{2}, \tag{1.8.3}$$

而隐变量理论结果是

$$-2\leqslant S_{HVT}\leqslant 2, \tag{1.8.4}$$

实验结果是 2.697±0.015. 对现实情况(考虑分析器立体角及探测器效率)，量子力学结果是 $S_{QM}=2.70\pm0.05$. 实验结果与量子力学符合极好，而破坏 Bell 不等式达 40 倍标准偏差.

关于隐变量理论能否正确描述物理世界，一直存在争论. 这个问题的另一方面就是量子力学描述是否完备. Bell 定理提出后，实验研究和理论工作大量涌现，争论更加激烈. 一个实验结果发表，往往会有批评认为实验有漏洞. 这些批评往往导致证明"漏洞不存在"的新实验，或是具有构思更巧妙的实验方法和性能更卓越的探测手段的实验.

光子在非线性晶体中的下转换提供了讨论 EPR 佯谬的实例. 共轭光子能量之和等于泵浦光子，即 $k_1+k_2=\text{const}$. 这两个光子发射时间相同，即 $t_1-t_2=0$. 而这相当于 $p_1+p_2=\text{const}$，$x_1-x_2=0$，是 EPR 在 1935 年提出的问题. 在 1.5.3 节中讨论的高可见度干涉仪正是为了验证 Bell 不等式建造的. 乔瑞宇将定域隐变量理论用于这个实验的情况. 由于 $\Delta L\gg$ 单光子相干长度，故分别在两个干涉仪内都没有单光子干涉. 根据隐变量理论，双光子干涉的可见度最多是 50%，实测的结果是 80.4%±0.6%，使 Bell 不等式破坏达 16 个标准偏差.

在这个实验基础上乔瑞宇研究组提出了"无漏洞 Bell 不等式实验"的建议[45]. 方法包括使用两块非线性晶体，实现起来比较复杂. P. G. Kwiat 等人[46]提供了更简单的方法. 他们使用非线性 BBO(beta barium borate)晶体，用"非共线第二型相位匹配"，直接产生偏振缠绕态. 在这类相位匹配中下转换光子位于两个锥面上，一个是寻常偏振，另一个是非常偏振. 将泵浦光方向与晶体轴间的角度调整合适，两个锥面就重叠(图 1.42). 这样两个锥体相交线的两个方向各在泵浦光方向的一侧. 沿着这两个方向(称为 1,2)出射的下转换光子正好是偏振缠绕态：

$$|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|H_1V_2\rangle+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\,|V_1H_2\rangle), \tag{1.8.5}$$

此处 H 和 V 分别代表水平(非常)和垂直(寻常)偏振. 相对相角 α 来自晶体双折射. 用附加

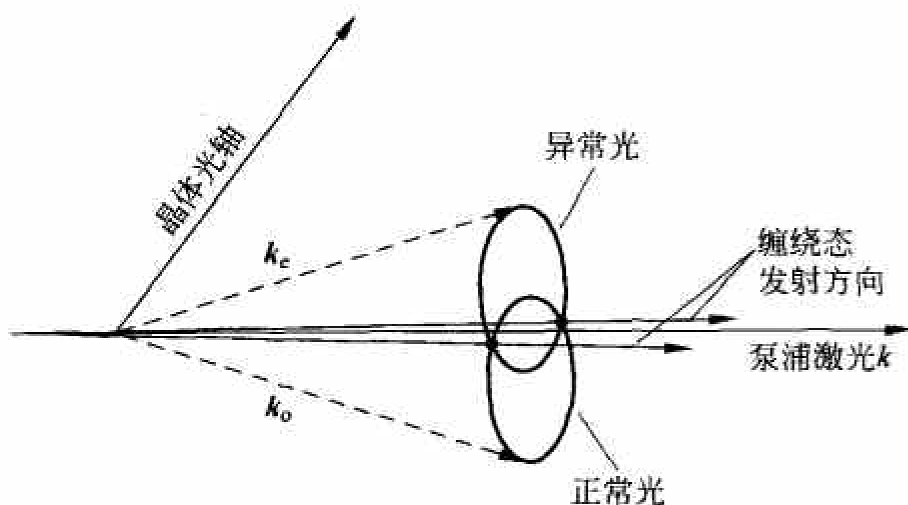


图 1.42 第二型相位匹配下转换偏振缠绕光子

的双折射移相器可以将 α 调整为 0 或 π. 通过在任何一路放置半波片可将 H 偏振和 V 偏振互换. 因此就能产生以下 4 种 EPR-Bell 态的任一种:

$$\left.\begin{aligned} |\psi^{\pm}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|H_1V_2\rangle \pm |V_1H_2\rangle) \\ |\varphi^{\pm}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|H_1H_2\rangle \pm |V_1V_2\rangle) \end{aligned}\right\} \tag{1.8.6}$$

例如从 $|\psi^{\pm}\rangle$ 出发,在第二束内放置半波片就得到 $|\varphi^{\pm}\rangle$. 由于光在晶体内有双折射,两束光的群速不同,会产生时间延迟和路径(水平、垂直方向)偏离,必须将它们限制在相干时间和相干长度内才能观察到干涉. 装置示于图 1.43. 在装置中用半波片 H_0 将 H 与 V 偏振互变,再通过同样双折射晶体 C_1 与 C_2 可将时间延迟和空间偏离纠正. 适当设定半波片 H_1 及四分之一波片 Q,可获得任一种 Bell 缠绕态(式(1.8.6)). P_1,P_2 为检偏器,D_1 和 D_2 是硅雪崩光电二极管. 研究组获得的最大可见度是(97.8±1.0)%.

用这个缠绕态检验 Bell 不等式,理论与式(1.8.1),式(1.8.2),式(1.8.4)相同. 令 $C(\theta_1,\theta_2)$ 代表检偏器读数为 θ_1,θ_2 时的符合计数率,定义

$$E(\theta_1,\theta_2) = \frac{C(\theta_1,\theta_2)+C(\theta_1^{\perp},\theta_2^{\perp})-C(\theta_1,\theta_2^{\perp})-C(\theta_1^{\perp},\theta_2)}{C(\theta_1,\theta_2)+C(\theta_1^{\perp},\theta_2^{\perp})+C(\theta_1,\theta_2^{\perp})+C(\theta_1^{\perp},\theta_2)}, \tag{1.8.7}$$

此处

$$\theta_1^{\perp} = \frac{\pi}{2}+\theta_1, \quad \theta_2^{\perp} = \frac{\pi}{2}+\theta_2.$$

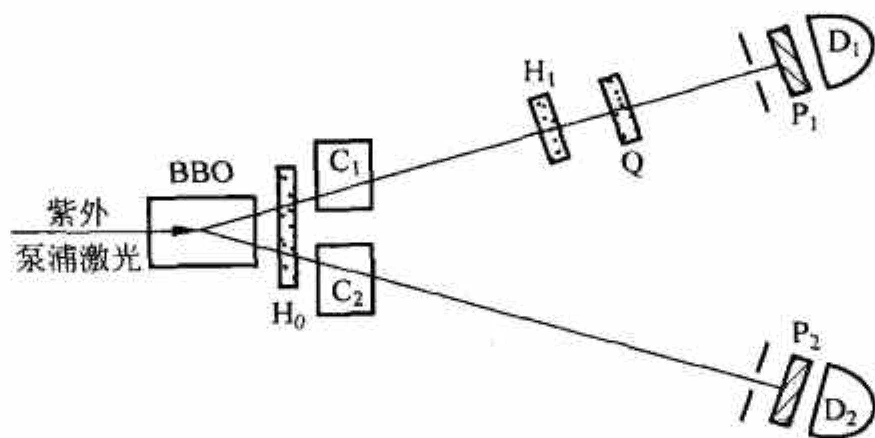


图 1.43 用下转换产生偏振缠绕态

观察到的关联用参数 S 表示：

$$S = E(\theta_1,\theta_2) + E(\theta_1',\theta_2) + E(\theta_1,\theta_2') - E(\theta_1',\theta_2'). \tag{1.8.8}$$

定域实在性理论给出 $|S| \leqslant 2$.

实验设定 $\theta_1 = -22.5°, \theta_1' = 22.5°, \theta_2 = -45°, \theta_2' = 0°$. 观察到的数据列于表 1.1.

表 1.1　不同 Bell 态测得的关联参数

EPR-Bell 态	$C(\theta_1,\theta_2)$	S
$\|\psi^+\rangle$	$\sin^2(\theta_1+\theta_2)$	-2.6489 ± 0.0064
$\|\psi^-\rangle$	$\sin^2(\theta_1-\theta_2)$	-2.6900 ± 0.0066
$\|\varphi^+\rangle$	$\cos^2(\theta_1-\theta_2)$	2.570 ± 0.014
$\|\varphi^-\rangle$	$\cos^2(\theta_1+\theta_2)$	2.529 ± 0.013

由于缠绕态是从晶体直接产生的，比过去实验报道的强度要大一个量级. 5min 产生的数据所得的 S 参数突破隐变量理论上限达 100 个标准偏差. 这在“无漏洞实验”方向上迈了一大步.

1.9　Wheeler 的推迟选择实验

在 EPR 佯谬的有关讨论中，涉及是否存在超距作用的问题. 对一个粒子测 S_x，根据结果就能对远方另一粒子的 S_x 做出确切预言. 如做另一种安排，测粒子的 S_y，则视结果就立即能对远方粒子的 S_y 做出预言. 为什么对一个粒子的测量选择能影响远处另一粒子性质的预测呢？隐变量理论用不存在超距作用否定量子力学的关联，企图用定域理论取系综平均得出关联的结果. 从 Bell 不等式被破坏看出，这个企图是失败的. 但能否用实验直接来判断对粒子的测量，或实验安排能否发出什么信息呢？1978 年 J. A. Wheeler[47] 提出问题：如关于测量光子路径或干涉条纹的选择是在光子通过狭缝之后突然决定的，实验结果是否和早做安排时一致？如果实验安排给光子传了信息，它就可以早做反应：是以波还是以粒子的面貌出现. 但若在它已通过狭缝后临时做出选择的决定，即使光子收到信息也来不及做改变了！因此，如果 Wheeler 问题的答案是“一致”，看来就不是什么传递信号的问题. 考虑如图 1.44 的安排，单个光子通过分束器 BS_1 进入干涉仪. 如果没有分束器 BS_2，探测器 D_1 和 D_2 就能判别光子走的“哪一条路径”，因而没有干涉. 但如在光子已进入干涉仪即将到达 BS_2 处的最后一刻装上 BS_2，仍然能得到干涉的结果，即和最初装有 BS_2 结果一致，就说明没有什么传递信息问题. 1987 年有两个组做了推迟选择实验. 其中一组 Hellmuth, Walter, Zajonc, Schleich[48] 的实验安排即如图 1.44 所示. 图 1.45 表示两束在透射和反射过程中相位变化情况，ϕ 代表两束到达 BS_2 时的相位差. 从 M_2 到 BS_2 束在反射时有相移 π，因反射是从光疏到光密①. 从图 1.45 标明的进入探测器 D_1 和 D_2 的相干束相位可以判断在不同相位差 ϕ 情况下两个探测器的计数率，列于表 1.2. 对任何确定的 ϕ，$N_1 + N_2 = N$（总计数率）.

① 分束器是未镀膜的. 从光疏到光密介质分界处的反射束有半波损失，即有相差 π.

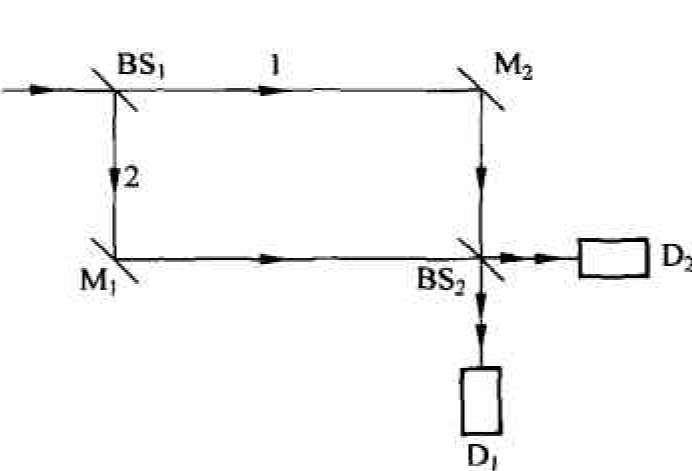


图 1.44 光子干涉实验装置

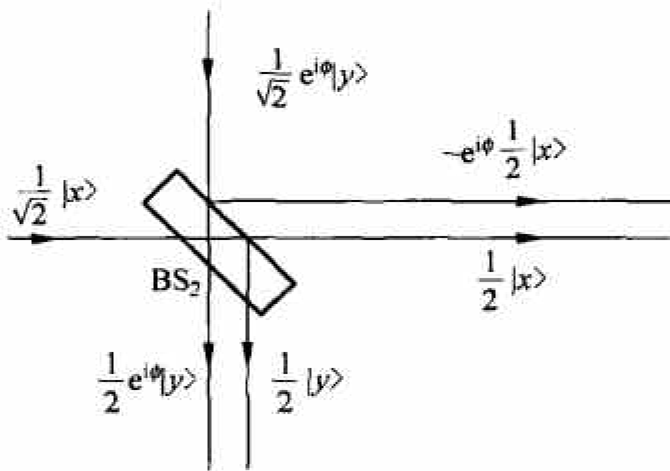


图 1.45 光束在分束器处组成相干束的相位关系

表 1.2 不同相位差下两个探测器的计数率

相位差	D_1 计数率 N_1/s	D_2 计数率 N_2/s
0	N	0
$\pi/2$	$N/2$	$N/2$
π	0	N

推迟选择实验的关键部件是 Pockel 盒. 它可以在几纳秒(ns)时间中被激活或退激. 在激活时它能使光偏振面旋转,在它后面放上偏振块,就能把偏振面旋转的光束反射偏转. 图 1.46 表示在图 1.44 的 BS_1 和 M_2 之间放上 Pockel 盒(PC)和偏振块(POL). 如盒被激活,则从 BS_1 过来的光子就经反射进入探测器 D_3. 如不激活,光子就到达 M_2. 这种安排所做的选择是: Pockel 盒激活——测光子路径(表现粒子性),Pockel 盒不激活——不测光子路径(表现波动性). 实验中采用皮秒(ps)Kr 离子激光器,脉冲宽度 150ps,采取措施使两个脉冲之间间隔足够大,并使用光学衰减器使每个脉冲平均光子数为 0.2,入射束经 BS_1 分为两束后进入两条单模光纤. 干涉由光电倍增管 D_1 和 D_2 探测. 如 Pockel 盒不激活,则 N_1,N_2 随 ϕ 变化就如表 1.2 所列,表示出干涉图像. 如 Pockel 盒激活,则 $N_3=N/2$,$N_1=N_2=N/4$,与 ϕ 无关,即没有干涉发生. 推迟选择实验的做法是: 不激活 Pockel 盒,所测计数表现干涉,这种安排称为正常模式. 激活 Pockel 盒,但在光脉冲已通过分束器 BS_1 后突然退激 Pockel 盒,这种操作称为推迟选择模式. 根据量子力学理论,两种模式应该得到同样结果. 在实验中激光脉冲交替进入正常模式或延迟选择模式. 两种模式分别用点(·)和加号(+)表示于图 1.47 中. 图(a)和图(b)分别是探测器 D_1 和 D_2 的 30s 计数. 计数存入多道分析器,横坐标相当于时间,每一道相当 0.25s. 时间轴是由光纤因温度引起的折射系数变化决定的. 从图中看出两种模式给出的干涉图样相同. 将两个探测器中两种模式计数之比随时间的变化画于图 1.48 中,得到

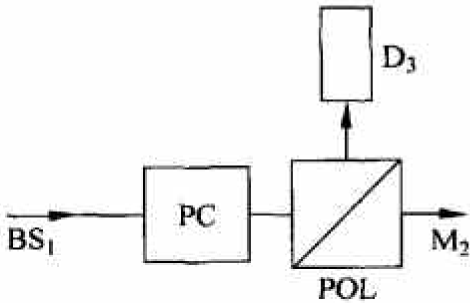


图 1.46 推迟选择模式安排原理图

$$\frac{\text{正常模式计数}}{\text{推迟选择模式计数}}=\begin{cases}1.00\pm0.02, & \text{探测器 } D_1;\\ 0.99\pm0.02, & \text{探测器 } D_2.\end{cases}$$

这和量子力学结论是完全一致的.

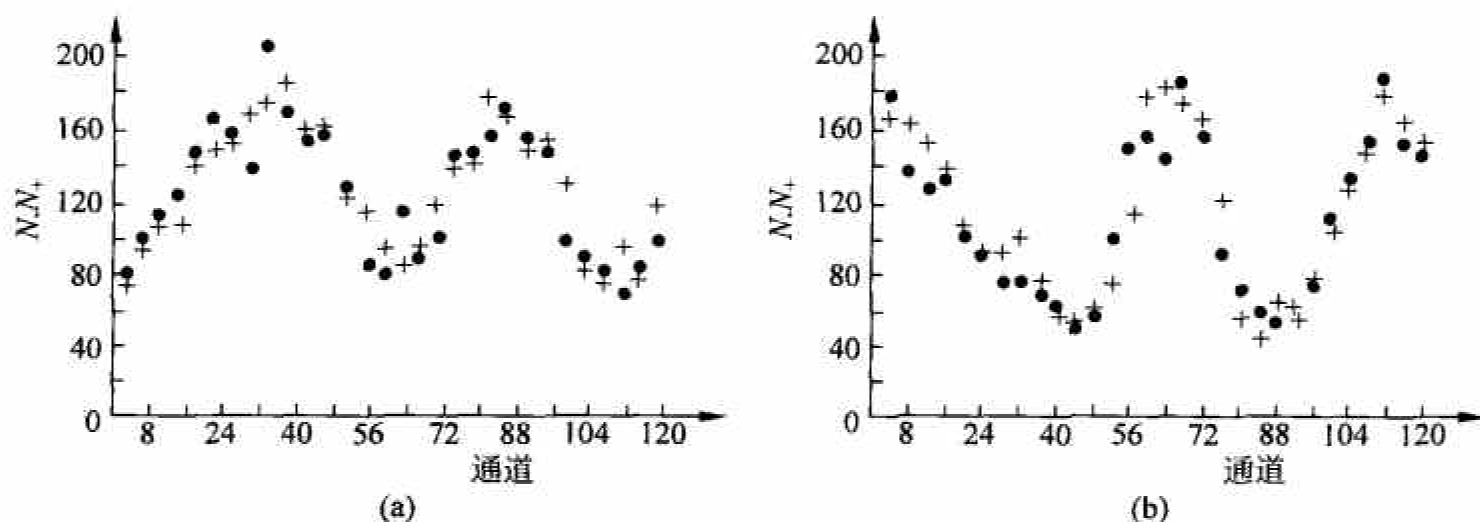


图 1.47　两种模式干涉图样相同

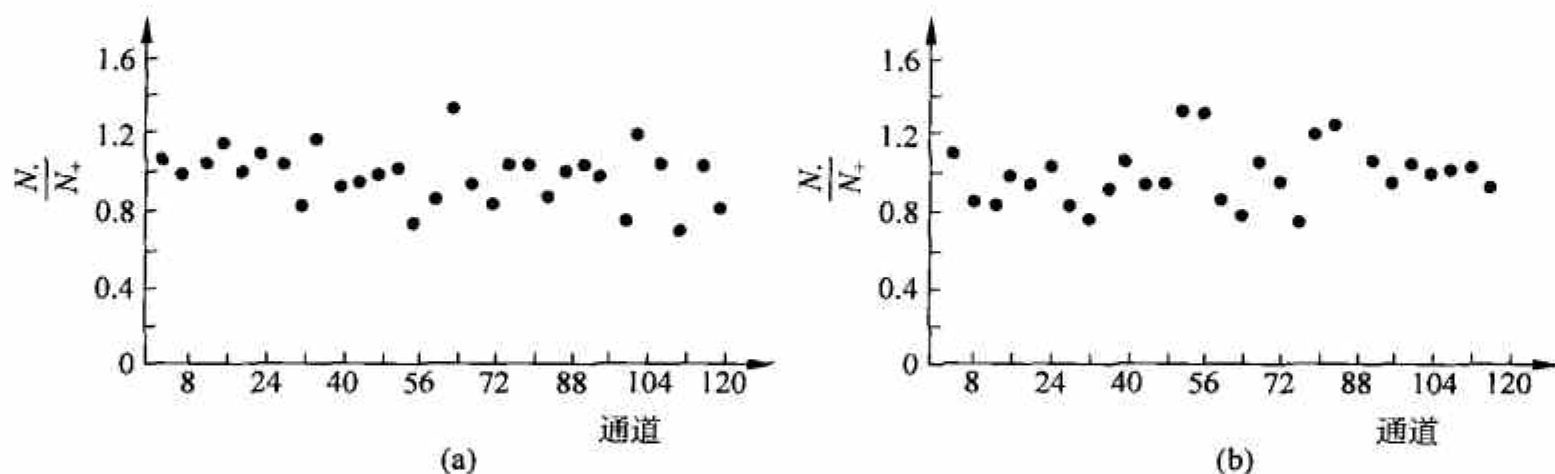


图 1.48　两种模式的计数比

隐变量理论和有关光的二象性延迟选择问题,都是涉及量子力学如何描述微观物理世界的根本问题.现在量子力学描述是否有什么带根本性的问题呢? R. P. Feynman 的一段话[49]深刻地反映出实际情况:"在了解量子力学代表的世界观方面我们一向有很多困难……你们知道从来每个新的想法总要经过一代或两代人才能明显看出它不再有真正的问题.我不能表述出(量子力学的)真正的问题,因此我猜想没有真正的问题,但我还不很肯定就没有真正的问题了."

1.10　不涉及不等式的 Bell 定理

1.10.1　三粒子完全关联

Bell 定理的证明从 EPR 否定量子力学关联的"定域性"出发,导致它和量子力学的矛盾.对于二粒子关联,如对一个粒子的测量结果可以给出第二个粒子某个性质的确切判断,这种关联称完全关联.如仅能对第二个粒子的某种性质给出几率分布的判断,则称为统计关联.在 1.7.3 节讨论的 Bohm 版本 EPR 佯谬,是通过对第一个粒子测$\hat{a}$方向的自旋分量做出对第二粒子自旋$\hat{b}$分量的判断.如$\hat{a}=\hat{b}$就是完全关联.$\hat{a}\neq\hat{b}$就是统计关联.在 Bell 定理用$\hat{a}\neq\hat{b}$导致了不等式.对二粒子系统在$\hat{a}=\hat{b}$的完全关联下,EPR 的矛盾暴露不出来. D. M.

Greenberger, M. A. Horne, A. Shimony 和 A. Zeilinger 提出[50,51]，对三个或更多的自旋 1/2 粒子系统在完全关联情况下，可以证明定域性和实在性的原则是和量子力学不相容的. 这样就不用不等式而证明了 Bell 定理. N. D. Mermin[52] 也有类似的考虑，下面描述的也是一个想象中的实验，但是有可能在实验室中实现. 一个动量为 0 的粒子衰变为三个质量相同的粒子. 如果三个粒子能量相同(可以在探测器前放上能量滤波器保证只记录能量相同的粒子)，则它们的动量方向间成 120°角(图 1.49). 在粒子源周围开 6 个孔，衰变粒子或是通过 a, b, c，或是通过 a′, b′, c′射出. 在孔外，三粒子体系的波函数是

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\rangle_1\ |b\rangle_2\ |c\rangle_3 + |a'\rangle_1\ |b'\rangle_2\ |c'\rangle_3), \tag{1.10.1}$$

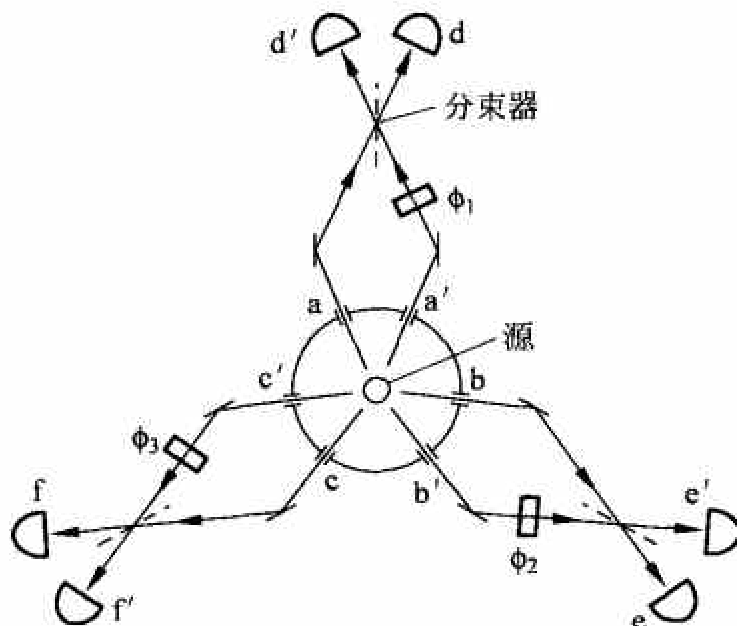


图 1.49 三粒子干涉仪示意图

此处 $|a\rangle_1$ 代表束 a 中的第一个粒子，依此类推. 束 a 和 a' 经反射后会聚于分束器. 从分束器射出的两束进入探测器 d 和 d′. 在 a' 束途中有一个可调的移相器产生相移 ϕ_1. 因此 $|a\rangle_1$ 和 $|a'\rangle_1$ 的演化分别是

$$|a\rangle_1 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|d\rangle_1 + \mathrm{i}\ |d'\rangle_1), \tag{1.10.2}$$

$$|a'\rangle_1 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_1}(|d'\rangle_1 + \mathrm{i}\ |d\rangle_1), \tag{1.10.3}$$

在分束器处反射束有 $\pi/2$ 相移. 粒子 2 和 3 的演化与此类似. 三个粒子的状态演化使缠绕态式(1.10.1)变为以下的线性组合：

$$\begin{aligned}|\Psi\rangle \rightarrow \frac{1}{4}[&(1-\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_1+\phi_2+\phi_3)})\ |d\rangle_1\ |e\rangle_2\ |f\rangle_3 + (\mathrm{i}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_1+\phi_2+\phi_3)})\ |d\rangle_1\ |e\rangle_2\ |f'\rangle_3\\ &+(\mathrm{i}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_1+\phi_2+\phi_3)})\ |d\rangle_1\ |e'\rangle_2\ |f\rangle_3 + (\mathrm{i}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_1+\phi_2+\phi_3)})\ |d'\rangle_1\ |e\rangle_2\ |f\rangle_3\\ &+(-1+\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_1+\phi_2+\phi_3)})\ |d\rangle_1\ |e'\rangle_2\ |f'\rangle_3 + (-1+\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_1+\phi_2+\phi_3)})\ |d'\rangle_1\ |e\rangle_2\ |f'\rangle_3\\ &+(-1+\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_1+\phi_2+\phi_3)})\ |d'\rangle_1\ |e'\rangle_2\ |f\rangle_3 + (-\mathrm{i}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_1+\phi_2+\phi_3)})\ |d'\rangle_1\ |e'\rangle_2\ |f'\rangle_3].\end{aligned} \tag{1.10.4}$$

第一项三个探测器 d, e, f 接收从 a, b, c 来的透射束(括弧中第一项是 1)，也接收从 a′, b′, c′ 来的(经移相)反射束(括弧中第二项 $\mathrm{i}^3 = -\mathrm{i}$). 和第一项相比，二、三、四项包含一个带撇号

的探测器，有一个透射束和一个反射束对调. 因此括弧中第一项变为 i，第二项系数是 $i^2=-1$. 五、六、七这三项包含两个带撇的探测器，括弧中第一项是 $i^2=-1$，第二项系数是 i. 最后一项是三个带撇的探测器，括弧中第一项是 $i^3=-i$，第二项系数是 1. 假定探测器是完全的，因此每组 3 个衰变粒子会使 d 或 d′的任一个，e 或 e′的任一个，f 或 f′的任一个记录粒子. 从式(1.10.4)可得探测几率为

$$P_{def}(\phi_1,\phi_2,\phi_3)=\frac{1}{8}[1+\sin(\phi_1+\phi_2+\phi_3)], \tag{1.10.5}$$

$$P_{d'e'f}(\phi_1,\phi_2,\phi_3)=\frac{1}{8}[1-\sin(\phi_1+\phi_2+\phi_3)]. \tag{1.10.6}$$

如带撇的探测器为偶(奇)数，则方括弧中第二项符号为正(负). 如令粒子进入不带撇的探测器记+1，进入带撇的探测器记−1，则测量的期望值是

$$\begin{aligned}E(\phi_1+\phi_2+\phi_3)=&P_{def}(\phi_1,\phi_2,\phi_3)+P_{de'f'}(\phi_1,\phi_2,\phi_3)\\&+P_{d'ef'}(\phi_1,\phi_2,\phi_3)+P_{d'e'f}(\phi_1,\phi_2,\phi_3)\\&-P_{d'ef}(\phi_1,\phi_2,\phi_3)-P_{de'f}(\phi_1,\phi_2,\phi_3)\\&-P_{def'}(\phi_1,\phi_2,\phi_3)-P_{d'e'f'}(\phi_1,\phi_2,\phi_3)\\=&\sin(\phi_1+\phi_2+\phi_3).\end{aligned} \tag{1.10.7}$$

如选择

$$\phi_1+\phi_2+\phi_3=\pi/2,$$

则有

$$E(\phi_1,\phi_2,\phi_3)=1; \tag{1.10.8}$$

如选择

$$\phi_1+\phi_2+\phi_3=3\pi/2,$$

则有

$$E(\phi_1,\phi_2,\phi_3)=-1. \tag{1.10.9}$$

这两种情况都属完全关联. 下面就可以演示 EPR 前提彼此矛盾. 由于定域性，对三个粒子分别做测量彼此完全独立. 设在态 λ 对粒子 1(移相 ϕ_1)做测量，所得结果为 $A_\lambda(\phi_1)$，有记录为+1，无记录为−1. 类似地对粒子 2，3 做测量，分别得 $B_\lambda(\phi_2)$，$C_\lambda(\phi_3)$. 对式(1.10.8)情况，有

$$\begin{aligned}&A_\lambda(\phi_1)B_\lambda(\phi_2)C_\lambda(\phi_3)=1,\\&\phi_1+\phi_2+\phi_3=\pi/2.\end{aligned} \tag{1.10.10a}$$

对式(1.10.9)的情况，有

$$\begin{aligned}&A_\lambda(\phi_1)B_\lambda(\phi_2)C_\lambda(\phi_3)=-1,\\&\phi_1+\phi_2+\phi_3=3\pi/2.\end{aligned} \tag{1.10.10b}$$

从式(1.10.10a)可得

$$A_\lambda(0)B_\lambda(0)C_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right)=1, \tag{1.10.11a}$$

$$A_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right)B_\lambda(0)C_\lambda(0)=1, \tag{1.10.11b}$$

$$A_\lambda(0)B_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right)C_\lambda(0)=1. \tag{1.10.11c}$$

由于这些数都是+1或-1,任何数都是自己的倒数.从式(1.10.11a),式(1.10.11b)可得

$$A_\lambda(0)C_\lambda(0)A_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right)C_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right)=1. \tag{1.10.11d}$$

从式(1.10.11c)得

$$A_\lambda(0)C_\lambda(0)=\frac{1}{B_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right)}=B_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right). \tag{1.10.11e}$$

式(1.10.11d)和式(1.10.11e)给出

$$A_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right)B_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right)C_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right)=1. \tag{1.10.11f}$$

式(1.10.11f)是属于 $\phi_1+\phi_2+\phi_3=3\pi/2$ 范畴的,因此和式(1.10.10b)矛盾,即量子力学结果式(1.10.7)是不能从"定域实在性"理论重现的.图1.49所示的装置称为三粒子干涉仪,是因为当固定两路相移而变更第三路相移时符合计数率(式(1.10.5)或式(1.10.6))呈正弦式的振荡:极小值为0,极大值是粒子从小孔中发射率的1/4.这可以称为三粒子的干涉条纹.如果只测任何两个探测器(例如e和f)的符合计数率,则从式(1.10.5)和式(1.10.6)得

$$P_{ef}(\phi_1,\phi_2)=P_{def}(\phi_1,\phi_2,\phi_3)+P_{d'ef}(\phi_1,\phi_2,\phi_3)=\frac{1}{4}.$$

即三粒子干涉仪不给出二粒子干涉图像.类似地,将 $P_{def}, P_{d'ef}, P_{de'f}, P_{d'e'f}$ 相加得 $P_f=\frac{1}{2}$,也和 ϕ 无关,即不给出单粒子干涉图像.

三粒子干涉仪在实现中会有困难.但二粒子体系也可用于不经不等式直接验证Bell定理,这是理论工作的进展.

1.10.2 不涉及不等式的 Bell 定理:二粒子情况

以下是 L. Hardy[53] 给出的证明.有两个粒子 $i=1,2$.选择正交归一基 $|\pm\rangle_i$,组成缠绕态

$$|\Psi\rangle=\alpha|+\rangle_1|+\rangle_2-\beta|-\rangle_1|-\rangle_2, \tag{1.10.12}$$

此处 α 和 β 是实数,并满足

$$\alpha^2+\beta^2=1. \tag{1.10.13}$$

引入另一组基 $|u_i\rangle, |v_i\rangle$:

$$|+\rangle_i=b\,|u_i\rangle+\mathrm{i}a^*\,|v_i\rangle, \tag{1.10.14a}$$

$$|-\rangle_i=\mathrm{i}a\,|u_i\rangle+b^*\,|v_i\rangle, \tag{1.10.14b}$$

此处

$$|a|^2+|b|^2=1. \tag{1.10.15}$$

原有基的正交性保证新基的正交性.式(1.10.14)的逆变换是

$$|u_i\rangle=b^*\,|+\rangle_i-\mathrm{i}a^*\,|-\rangle_i, \tag{1.10.16a}$$

$$|v_i\rangle=-\mathrm{i}a\,|+\rangle_i+b\,|-\rangle_i, \tag{1.10.16b}$$

用新基表示的 $|\Psi\rangle$ 是

$$\begin{aligned}|\Psi\rangle=&(\alpha b^2+\beta a^2)\,|u_1\rangle\,|u_2\rangle+\mathrm{i}(\alpha a^*b-\beta ab^*)\,|u_1\rangle\,|v_2\rangle\\&+\mathrm{i}(\alpha a^*b-\beta ab^*)\,|v_1\rangle\,|u_2\rangle-\left(\alpha a^{*2}+\beta b^{*2}\right)\,|v_1\rangle\,|v_2\rangle.\end{aligned} \tag{1.10.17}$$

要求$|u_1\rangle|u_2\rangle$的系数为0[①]，即

$$\frac{a^2}{\alpha}=-\frac{b^2}{\beta}\equiv k^2,$$

或

$$a=k\sqrt{\alpha},\quad b=\mathrm{i}k\sqrt{\beta}. \tag{1.10.18}$$

此处取了正平方根．常数k可以通过适当选a和b的相角定为实数．式(1.10.15)和式(1.10.18)给出

$$k^2=\frac{1}{|\alpha|+|\beta|}. \tag{1.10.19}$$

将式(1.10.18)代回式(1.10.17)并用式(1.10.19)，得到

$$|\Psi\rangle=-\left[-\frac{\alpha\beta}{|\alpha|-|\beta|}|u_1\rangle|u_2\rangle+\sqrt{\alpha\beta}|u_1\rangle|v_2\rangle+\sqrt{\alpha\beta}|v_1\rangle|u_2\rangle+(|\alpha|-|\beta|)|v_1\rangle|v_2\rangle\right]$$

$$=\left[\frac{\sqrt{\alpha\beta}}{\sqrt{|\alpha|-|\beta|}}|u_1\rangle+\sqrt{|\alpha|-|\beta|}|v_1\rangle\right]\left[\frac{\sqrt{\alpha\beta}}{\sqrt{|\alpha|-|\beta|}}|u_2\rangle+\sqrt{|\alpha|-|\beta|}|v_2\rangle\right] \tag{1.10.20}$$

再换第三组基$|c_i\rangle$，$|d_i\rangle$：

$$|c_i\rangle=A|u_i\rangle+B|v_i\rangle, \tag{1.10.21a}$$

$$|d_i\rangle=-B^*|u_i\rangle+A^*|v_i\rangle. \tag{1.10.21b}$$

它的逆变换是

$$|u_i\rangle=A^*|c_i\rangle-B|d_i\rangle, \tag{1.10.22a}$$

$$|v_i\rangle=B^*|c_i\rangle+A|d_i\rangle. \tag{1.10.22b}$$

上二式中的A与B分别是

$$A=\frac{\sqrt{\alpha\beta}}{\sqrt{1-|\alpha\beta|}},\quad B=\frac{|\alpha|-|\beta|}{\sqrt{1-|\alpha\beta|}}. \tag{1.10.23}$$

从α,β的归一化条件(式(1.10.13))得到A,B的归一化条件：

$$|A|^2+|B|^2=1. \tag{1.10.24}$$

用基$|c_i\rangle$和$|u_i\rangle$可以将$|\Psi\rangle$表示为

$$|\Psi\rangle=N(|c_1\rangle|c_2\rangle-A^2|u_1\rangle|u_2\rangle), \tag{1.10.25}$$

此处

$$N=\frac{1-|\alpha\beta|}{|\alpha|-|\beta|}.$$

从式(1.10.25)出发，可以将$|\Psi\rangle$用不同的基表示为4种等价形式：

(1) 用u_1,v_1；u_2,v_2(这是原有的形式)

$$|\Psi\rangle=N(AB|u_1\rangle|v_2\rangle+AB|v_1\rangle|u_2\rangle+B^2|v_1\rangle|v_2\rangle); \tag{1.10.26a}$$

(2) 用c_1,d_1；u_2,v_2(用式(1.10.21a)置换$|c_2\rangle$，用式(1.10.22a)置换$|u_1\rangle$)

$$|\Psi\rangle=N[|c_1\rangle(A|u_2\rangle+B|v_2\rangle)-A^2(A^*|c_1\rangle-B|d_1\rangle)|u_2\rangle], \tag{1.10.26b}$$

(3) 用u_1,v_1；c_2,d_2(用式(1.10.21a)置换$|c_1\rangle$，用式(1.10.22a)置换$|u_2\rangle$)

$$|\Psi\rangle=N[(A|u_1\rangle+B|v_1\rangle)|c_2\rangle-A^2|u_1\rangle(A^*|c_2\rangle-B|d_2\rangle)], \tag{1.10.26c}$$

① 这是关键的一步，其作用是导致下文的式(1.10.28a).

(4) 用 c_1, d_1；c_2, d_2（用式(1.10.21a)置换 $|u_1\rangle|u_2\rangle$）

$$|\Psi\rangle = N[|c_1\rangle|c_2\rangle - A^2(A^*|c_1\rangle - B|d_1\rangle)(A^*|c_2\rangle - B|d_2\rangle)]. \quad (1.10.26d)$$

定义物理可观测量 U_i 和 D_i，相应的算符是

$$\hat{U}_i = |u_i\rangle\langle u_i|, \quad \hat{D}_i = |d_i\rangle\langle d_i|. \quad (1.10.27)$$

它们的本征值是 0 或 1. 例如 $\hat{U}_i|u_i\rangle = |u_i\rangle$，$\hat{U}_i|v_i\rangle = 0$. 一般情况下，$\hat{U}_i$ 和 $\hat{D}_i$ 不对易，即对任一个粒子，不能同时精确地量测其 U_i 与 D_i. 从式(1.10.26a)可以看出，如同时测量 U_1 和 U_2，有

$$U_1U_2 = 0, \quad (1.10.28a)$$

这是在式(1.10.17)中要求 $|u_1\rangle|u_2\rangle$ 的系数为 0 的结果. 下面要为隐变量理论设计一个陷阱 $U_1(\lambda)U_2(\lambda)=1$，显见此结果与式(1.10.28a)矛盾. 从式(1.10.26b)可知如果对粒子 1 测 D_1，对粒子 2 测 U_2，那么(因只有 $|d_1\rangle|u_2\rangle$ 项包含 $|d_1\rangle$)

$$\text{如 } D_1 = 1, \quad \text{则有 } U_2 = 1. \quad (1.10.28b)$$

类似地，从式(1.10.26c)可知，如对粒子 1 测 U_1，对粒子 2 测 D_2，那么

$$\text{如 } D_2 = 1, \quad \text{则有 } U_1 = 1. \quad (1.10.28c)$$

最后，从式(1.10.26b)可知，如对粒子 1 测 D_1，对粒子 2 测 D_2，那么

$$\text{测得 } D_1 = 1, \quad D_2 = 1 \text{ 的几率为 } |NA^2B^2|^2. \quad (1.10.28d)$$

以上都是量子力学的预言.

下面将直接证明，定域实在性理论是和量子力学不相容的. 用隐变量 λ 描述一对粒子，不同 λ 值的粒子对组成一个系综. 待粒子彼此远离后再对它们进行测量. 如一次测量给出 $D_1=1, D_2=1$，这是量子力学式(1.10.28d)允许的. 既然 $D_1=1$，则根据式(1.10.28b)，如对 U_2 进行测量，应得 $U_2=1$. 根据定域性的观点，这个结果应与对粒子 1 进行什么测量毫无关系，即 $U_2(\lambda)=1$. 同理，根据式(1.10.28c)，$D_2=1$ 意味着 $U_1=1$，用定域性有 $U_1(\lambda)=1$. 总起来，如测得 $D_1=1, D_2=1$，定域性预言 $U_1(\lambda)U_2(\lambda)=1$，意为如对这对粒子不测 D_1, D_2 而测 U_1, U_2，就应有 $U_1U_2=1$，和量子力学预言(式(1.10.28a))矛盾. 实在性前提要求：既然式(1.10.28b)和式(1.10.28c)分别预言了 $U_2=1$ 和 $U_1=1$(几率为 1)，而且在测量 D_1 时没有干扰粒子 2，测量 D_2 时没有干扰粒子 1，U_1 和 U_2 就有"实在的元素"，这就导致与量子力学的矛盾.

以上的证明取决于测得 $D_1=1, D_2=1$ 的几率

$$|NA^2B^2|^2 = \left[\frac{(|\alpha|-|\beta|)|\alpha\beta|}{1-|\alpha\beta|}\right]^2.$$

如 α, β 其中之一为 0，此几率为 0. 意为 $|\varphi\rangle$ 为乘积态，不是缠绕态. 另外 $|\alpha|=|\beta|$，这是最大缠绕态，几率也为 0. 因此，Hardy 的证明对除最大缠绕态以外的任何二粒子缠绕态，Bell 定理成立.

T. F. Jordan[54] 和 S. Goldstein[55] 分别对二粒子态给出了 Bell 定理的证明.

1.10.3　二粒子体系不涉及不等式 Bell 定理的实验验证

实验的原理图示于图 1.50，该实验是在 Mandel 研究组进行的[56,57]. 参量下转换(图中 PDC)的两个光子同时从非线性晶体射出. 用旋光器使两个光子偏振正交(以 x 和 y 表示).

它们从相反方向射在分束器 BS 上，并在此混合. 两个混合束从方向 1 和 2 射出. 分束器是非对称的. 令 T 和 T'分别代表向 1 和 2 方向的透射系数，R 和 R'分别代表向 2 和 1 方向的反射系数. 由于光是接近法线入射，这些系数可以认为与偏振无关. 离开分束器的光子对量子状态是

$$|\psi\rangle = TT' |1\rangle_{1x} |1\rangle_{2y} + RR' |1\rangle_{1y} |1\rangle_{2x} + TR' |1\rangle_{1x} |1\rangle_{1y} + T'R |1\rangle_{2x} |1\rangle_{2y}. \tag{1.10.29}$$

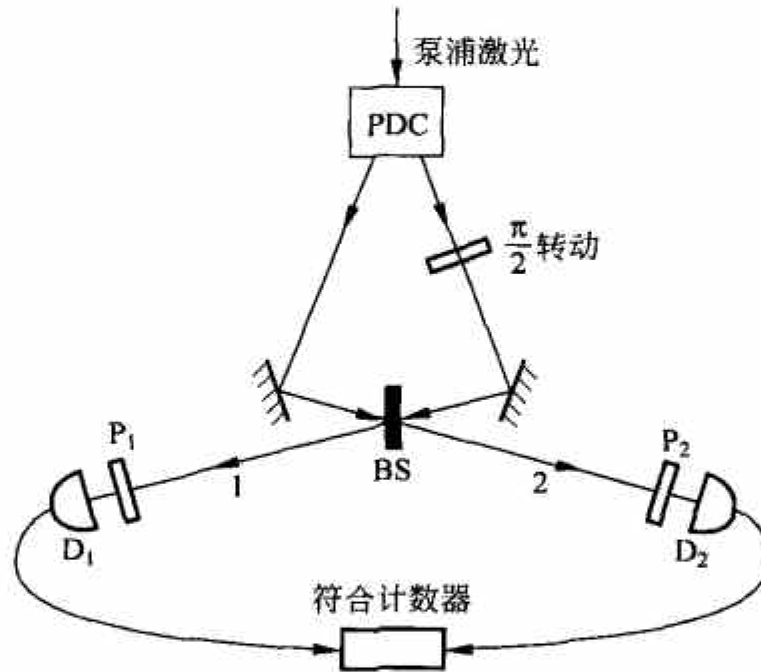


图 1.50　实验装置示意图

$|1\rangle_{2y}$代表 1 个光子向方向 2 传播，偏振为 y，余类推. 上式等号右边第三、四项对符合计数没有贡献. 光子经检偏器 P_1，P_2 后分别进入探测器 D_1，D_2. 记 $P_j(\theta)$为探测器 $D_j(j=1,2)$探测光子的几率，θ 为检偏器设定的角度，$\bar{\theta}=\theta+\pi/2$ 是和 θ 正交的偏振方向. 完全的检偏器和探测器保证 $P_j(\theta)+P_j(\bar{\theta})=1$. 记 $P_{12}(\theta_1,\theta_2)$为检偏器设定角度分别为 θ_1，θ_2 时两个探测器同时各记录一个光子的几率，$P_{12}(\theta_1,-)$代表检偏器 P_1 设定于 θ_1，方向 2 没有检偏器时的符合计数几率. 它满足

$$P_{12}(\theta_1,-) = P_{12}(\theta_1,\theta_2) + P_{12}(\theta_1,\bar{\theta}_2), \tag{1.10.30}$$

此处 θ_2 是任意的. 类似地有

$$P_{12}(-,\theta_2) = P_{12}(\theta_1,\theta_2) + P_{12}(\bar{\theta}_1,\theta_2). \tag{1.10.31}$$

在给定参数 T，T'，R，R'的情况下，可以找到 θ_1，θ_2，θ_1'，θ_2'特定的值，使得以下关系成立[57]：

$$P_{12}(\theta_1,\bar{\theta}_2') = 0, \tag{1.10.32a}$$

$$P_{12}(\bar{\theta}_1',\theta_2) = 0, \tag{1.10.32b}$$

$$P_{12}(\theta_1',\theta_2') = 0, \tag{1.10.32c}$$

$$P_{12}(\theta_1,\theta_2) > 0. \tag{1.10.32d}$$

这些是量子力学的结果. 从式(1.10.30)和式(1.10.32a)可以得到

$$P_{12}(\theta_1,-) = P_{12}(\theta_1,\theta_2'). \tag{1.10.33}$$

这个等式的意义是，在方向 1 的光子偏振为 θ_1 时，方向 2 光子偏振为 θ_2'的几率为 1. 根据 EPR 前提②，测方向 1 光子的偏振不扰动方向 2 的光子且能确定预言它的偏振，故这个偏

振是实在性的元素，从式(1.10.31)和式(1.10.32b)可以得到

$$P_{12}(-,\theta_2)=P_{12}(\theta_1',\theta_2). \tag{1.10.34}$$

用上面同样的推理，可断定 θ_1' 是实在性的元素，这相当于式(1.10.28b)和式(1.10.28c). 再考虑 $P_{12}(\theta_1,\theta_2)>0$. 既然 θ_1 出现，就有 $\Pi^\lambda(2)=\theta_2'$，此处 $\Pi^\lambda(2)$ 是方向 2 光子在隐变量 λ 所确定状态中的偏振. 由 EPR 前提②确定它是 θ_2'. 同理，有 $\Pi^\lambda(1)=\theta_1'$. 这样就应有 $P_{12}(\theta_1',\theta_2')>0$，和式(1.10.32c)矛盾. 推理办法与 1.10.2 节是一样的. 在文献[56]和[57]的实验中 $|T|^2=0.70$，$|R|^2=0.30$，算出 $\theta_1=74.3°$，$\theta_2=15.7°$，$\theta_1'=-56.8°$，$\theta_2'=-33.2°$. 实验测出 $P_{12}(\theta_1',\theta_2)=P_{12}(\theta_1,\theta_2')=0.98$，$P_{12}(\theta_1,\theta_2)=0.099$. 根据 EPR 原则，应有

$$P_{12}(\theta_1',\theta_2')=0.099\times 0.98\times 0.98=0.095,$$

实验给出

$$P_{12}(\theta_1',\theta_2')=0.0070\pm 0.0005$$

和 EPR 预言相差 45 倍标准偏差.

1.10.4 三光子缠绕态的实验实现以及对定域实在论的否定

以上描述的三粒子干涉仪在实现中是有困难的. 三粒子缠绕态的优越性在于能够对量子力学与定域实在性理论的矛盾给予“非统计性”的实验证明. “统计性”的证明则需要测量许多对缠绕粒子积累的数据，Zeilinger 的研究组[58]提出了用两对偏振缠绕光子实现三个光子的缠绕态，余下一个独立光子. 这个想法已由同研究组在实验中实现[59]. 在实验装置示意图 1.51 中紫外光短脉冲经过 BBO 晶体产生两对缠绕光子，每一对缠绕光子的偏振状态由下式给出：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle_a|V\rangle_b-|V\rangle_a|H\rangle_b),$$

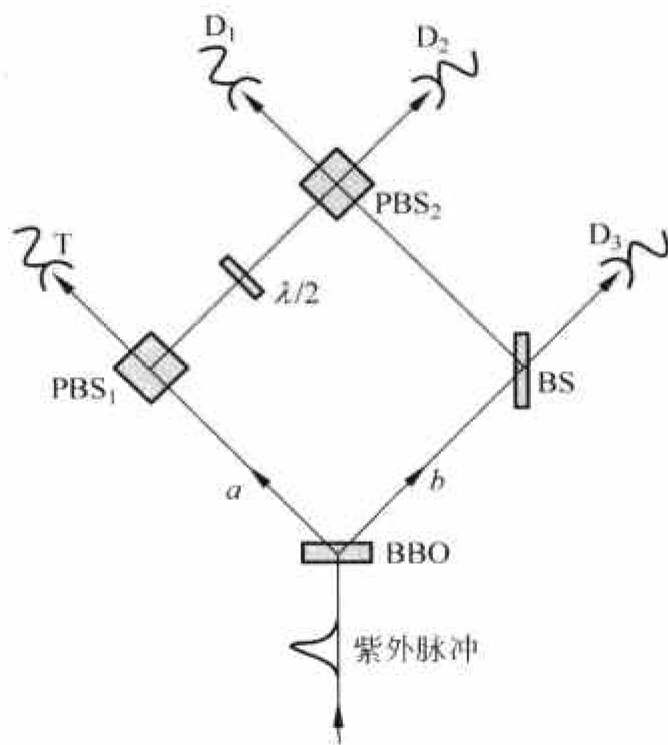


图 1.51 三光子缠绕态产生实验装置示意图

它代表 a 与 b 两束的偏振态的两种可能. H 是水平偏振，V 是垂直偏振，两种可能是相干叠加的. 束 a 射入偏振分束器(图中 PBS_1)，垂直偏振光子被反射，而水平偏振光子则透射进入探测器 T. 束 b 射入与偏振无关的分束器(图中 BS)，50%透射进入探测器 D_3，50%被反射进入另一个偏振分束器 PBS_2，在此处 H 偏振光子透射进入探测器 D_1 而 V 偏振光子被反射而进入探测器 D_3. 设一个紫外光脉冲产生了两对缠绕光子，而 4 个光子都分别被 4 个探测器 T，D_1，D_2，D_3 符合探测到. 以下将要证明，由于紫外光脉冲(约 200fs)远小于光子的相干时间(实验中达到 500fs)，两对缠绕光子中的一个光子(触发光子)被探测器 T 记录时，其他三个光子即构成偏振缠绕光子：不可能区分哪两个光子原属于一对缠绕光子. 理由如下：当符合发生时，探测器 T 记录的触发光子是 H 偏振的；它的伴侣一定是 V 偏振的，沿 b 束到达 BS′. 在此它有 50%的几率前往探测器 D_3 并被记录到，另外有 50%的几率被反射到达 PBS_2，再被反射进入探测器 D_2. 先考虑第一种可能. 此时探测器 D_1，D_2 记录的必然是另一对缠绕光子. 沿 a 束的必然是 V 偏振的，它在 PBS_1 处被反射到达

PBS_2. 在此以前它通过半波片(图中 $\lambda/2$)，偏振被旋转 45°，成为 V 与 H 的等权重相干叠加. 沿 b 束的光子是 H 偏振的，在 PBS_2 处透射进入探测器 D_1. a 束光子到达 PBS_2 时其 H 偏振成分(50%)透射进入探测器 D_2. 这一对分别被 D_1，D_2 记录，与前一对组成四重符合. 探测器记录的是

$$|H\rangle_1\ |H\rangle_2\ |V\rangle_3. \tag{1.10.35}$$

第二种可能是触发光子与其伴侣分别被探测器 T 和 D_2 记录. 第二对光子中沿 b 束的是 H 偏振的，它在 BS 处透射进入 D_3，而它的伴侣在 PBS_1 处因其 V 偏振被反射，通过半波片 $\lambda/2$ 到达 PBS_2，并在此处因其 V 成分(50%)被反射而到达 D_1. 探测器记录的是

$$|V\rangle_1\ |V\rangle_2\ |H\rangle_3. \tag{1.10.36}$$

一般说来，两个可能状态式(1.10.35)与式(1.10.36)并不形成相干叠加，因为它们源自两个独立光子对，它们在原则上是可以区分的，例如根据不同的发射时间. 但这种信息可以因紫外激光的短暂(200fs)和光子相干时间很长而被涂消，此时就形成三个偏振缠绕光子的 GHZ (Grunberger-Horne-Zeilinger)态.

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle_1\ |H\rangle_2\ |V\rangle_3+|V\rangle_1\ |V\rangle_2\ |H\rangle_3). \tag{1.10.37}$$

上式两项中间的加号需要证明. 初始两对的状态为

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle_a\ |V\rangle_b-|V\rangle_a\ |H\rangle_b)(|H\rangle'_a|V\rangle'_b-|V\rangle'_a|H\rangle'_b). \tag{1.10.38}$$

不带撇的和带撇的极化状态分别指第一对和第二对. 在装置中式(1.10.38)的各分量演化为

$$\left.\begin{aligned}&|H\rangle_a\to|H\rangle_T,\quad |H\rangle_b\to\frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle_1+|H\rangle_3);\\&|V\rangle_a\to\frac{1}{\sqrt{2}}(|V\rangle_1+|V\rangle_2),\quad |V\rangle_b\to\frac{1}{\sqrt{2}}(|V\rangle_2+|V\rangle_3).\end{aligned}\right\} \tag{1.10.39}$$

第二对演化与第一对相似. 只取对四重符合有贡献的项，得到

$$\frac{1}{2}\{|H\rangle_T(|H\rangle'_1|H\rangle'_2|V\rangle_3+|V\rangle'_1|V\rangle_2\ |H\rangle'_3)+(|H\rangle_1\ |H\rangle_2\ |V\rangle'_3+|V\rangle_1\ |V\rangle'_2|H\rangle_3)\}. \tag{1.10.40}$$

如两对光子不能区别，就有

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\ |H\rangle_T(|H\rangle_1\ |H\rangle_2\ |V\rangle_3+|V\rangle_1\ |V\rangle_2\ |H\rangle_3). \tag{1.10.41}$$

这印证了式(1.10.37). 在实验中如何能证明这是三个光子的缠绕态而不是这两项的混合态呢？尽管在实验中确证了上式中的两种偏振状态，但这还不够，还要证明它们是相干叠加. 在 D_1 前的检偏器置于 45°，即 $|45°\rangle_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle_1+|V\rangle_1)$，从而将上面的状态投影到

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\ |45°\rangle_1(|H\rangle_2\ |V\rangle_3+|V\rangle_2\ |H\rangle_3).$$

将括弧中的光子 2 及 3 的状态用 $|45°\rangle$，$|-45°\rangle$ 基表示，有

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|45°\rangle_2\ |45°\rangle_3-|-45°\rangle_2\ |-45°\rangle_3),$$

即光子 2 及 3 偏振态相同. $|45°\rangle_2|-45°\rangle_3$ 和 $|-45°\rangle_2|45°\rangle_3$ 态的不存在是光子偏振缠绕的

明证. 图 1.52 给出三光子缠绕的证明. 四重符合记数作为 a 束光程延迟的函数绘于图(a), 偏振 $|45°\rangle_1|-45°\rangle_2|-45°\rangle_3$ 为实方点, $|45°\rangle_1|-45°\rangle_2|45°\rangle_3$ 为实圆点. 延迟为 0 时两条曲线的差别说明相干叠加, 即后一种偏振状态不存在. 图(b)为 D_1 偏振置于 0°时的情况. 测量结果可见度高达 75%. 延迟增加, 两对趋于不能辨认, 相干趋于消失. 当然也可以认为, 在零延迟时 D_1 和 D_3 的光子由于 D_2 的光子被投影到 $|-45°\rangle$ 而被投影到二粒子缠绕态. 为了得到进一步的信息, 将 D_1 处的起偏器置于 0°(V 极化). GHZ 态另两个光子应处于 $|V\rangle_2|H\rangle_3$ 态, 它在 $|45°\rangle$ 基上不给出这两个光子的任何关联. 在图 1.52(b)中不论延迟大小方点与圆点没有区别, 证明不存在二光子关联.

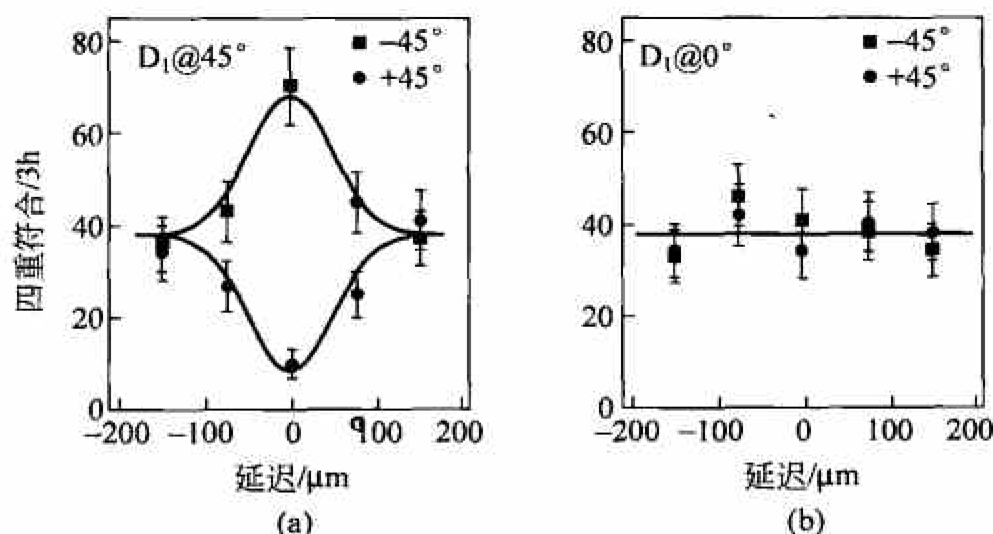


图 1.52 三光子缠绕态的实验证明

同一个研究组[60]用另一个 GHZ 态

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle_1\,|H\rangle_2\,|H\rangle_3 + |V\rangle_1\,|V\rangle_2\,|V\rangle_3) \tag{1.10.42}$$

来检验量子非定域性. 考虑不同的极化测量: 从原来的 H/V 方向转 45°, 称为 H'/V' 方向, 或测量圆偏振, 称为 L/R. 新的极化态与原来的 H/V 态的关系为

$$\left.\begin{aligned} |H'\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + |V\rangle), \quad |V'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - |V\rangle); \\ |R\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + \mathrm{i}\,|V\rangle), \quad |L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - \mathrm{i}\,|V\rangle). \end{aligned}\right\} \tag{1.10.43}$$

为方便起见, 称 H'/V' 测量为 x 测量, L/R 测量为 y 测量. GHZ 态(1.10.42)可以用新的基表示, 例如对 yyx 测量它可以表示为

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2}(|R\rangle_1\,|L\rangle_2\,|H'\rangle_3 + |L\rangle_1\,|R\rangle_2\,|H'\rangle_3 + |R\rangle_1\,|R\rangle_2\,|V'\rangle_3 + |L\rangle_1\,|L\rangle_2\,|V'\rangle_3). \tag{1.10.44}$$

用循环排列, 可以得到对 yxy 和 xyy 测量的 GHZ 态. 从这样的状态得出, 对两个光子, 例如 1 和 2 进行测量, 对相应的第 3 个光子的极化状态就可以确定地预言. 由于三光子缠绕态已经有了实验上有力的确证, 定域实在论者应该对这些状态给予他们自己的诠释. 由于预言和在测量中光子的距离及测量的时间顺序无关, 我们假定对三个光子的测量是同时进行的. EPR 定域性要求, 对任何一个光子测量的结果应该和对另两个光子进行什么样子的测量以及其结果无关. 对 GHZ 态的现实, 必须假设每个光子对 x 测量和 y 测量都有"实在性的元

素”，它们在测量结果中应该体现出来．记这些元素 $H'(V')$ 为 $X_i=+1(-1)$，元素 $R(L)$ 为 $Y_i=+1(-1)$．为了和GHZ态 $|\Psi\rangle$ 的量子理论预言符合，测量 yyx 的结果要求 $Y_1Y_2X_3=-1$，$Y_1X_2Y_3=-1$，$X_1Y_2Y_3=-1$．循环排列的结果也类似．根据定域实在论，任何一个特定的测量 x 都必须独立于对其他两个光子进行 x 或 y 测量．由于 $Y_iY_i=+1$，有 $X_1X_2X_3=(X_1X_2Y_3)(Y_1X_2Y_3)(Y_1Y_2X_3)=-1$．因此定域实在论的结论是，进行 xxx 测量的可能结果是 $V'V'V'$，$H'H'V'$，$H'V'H'$ 和 $V'H'H'$．将 $|\Psi\rangle$ 表示为 H'/V' 基，有

$$|\Psi\rangle=\frac{1}{2}(|H'\rangle_1\ |H'\rangle_2\ |H'\rangle_3+|H'\rangle_1\ |V'\rangle_2\ |V'\rangle_3+|V'\rangle_1\ |H'\rangle_2\ |V'\rangle_3+|V'\rangle_1\ |V'\rangle_2\ |H'\rangle_3). \tag{1.10.45}$$

因此量子力学给出的 xxx 测量结果和定域实在论直接矛盾．结果示于图1.53．

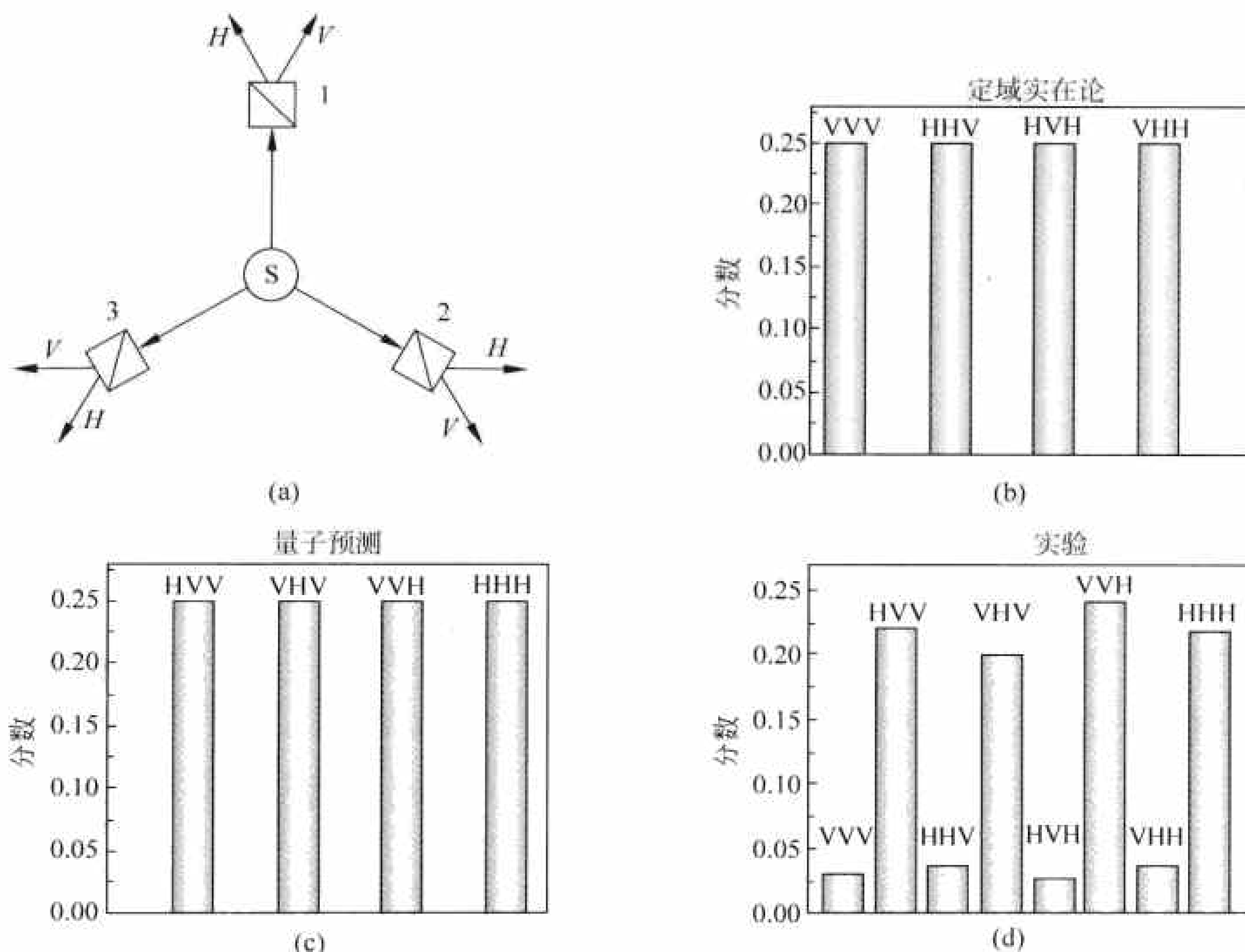


图1.53 三光子缠绕GHZ态导致量子力学与定域实在论矛盾．取自[60]

1.10.5 在缠绕与非定域性意义下的EPR佯谬

EPR的原始意图是要说明量子力学是不完备的，因为在二粒子系统的一维运动中 x_2 和 p_2 的值可以确切决定，因此 $(\Delta x_2)^2(\Delta p_2)^2\geqslant\hbar^2/4$ 被破坏．考虑EPR算符 $\hat{x}_1+\hat{x}_2$ 和 $\hat{p}_1-\hat{p}_2$．联合不确定性乘积 $\left(\Delta(\hat{x}_1+\hat{x}_2)\right)^2\left(\Delta(\hat{p}_1-\hat{p}_2)\right)^2$ 的值决定性地依赖量子态的性质：是可分离的还是缠绕的．段鲁明等[61]从可分离性定义出发，证明了一个定理：对可分离的连续变量状态，联合不确定性乘积是有下限的，而它的值是源于不确定性关系的．因此破坏这个下限就是不可分离性(缠绕)的充要判据．S. Manchini等[62]证明了一个定理：对任意可分

离量子态定义算符 $u=q_1+q_2, v=p_1-p_2$，考虑到$[q_j, p_j]$是个 c 数($j=1,2$)，不等式 $\langle(\Delta u)^2\rangle\langle(\Delta v)^2\rangle \geqslant |\langle[q_1, p_1]\rangle|^2$ 成立. 对我们考虑的情况，这个定理的特例是：

$$(\Delta(\hat{x}_1+\hat{x}_2))^2(\Delta(\hat{p}_1-\hat{p}_2))^2 \geqslant \hbar^2.$$

最大缠绕 EPR 态在实验室中不能实现，但一对参量下转换光子在适当条件下可以认为是这样态的近似. Rochester 大学的研究组[63]进行了这样光子对的大距离位置和动量关联测量. BBO 晶体用 390nm 激光束泵浦可产生参量下转换光子对. 用棱镜把泵浦光和下转换光分离. 两个光子极化态正交，可以用极化分束器(PBS)将它们分开. 滤光器后面的显微镜物镜将通过的光聚焦到雪崩光二极管(APD)单光子计数装置上.

要测量光子的位置关联，在分束器前放置一个透镜，将晶体的出射面聚焦在两个狭缝的平面上成像(图 1.54(a)). 一个狭缝固定在最大信号强度处，移动另一个狭缝以记录作为狭缝位移函数的光子符合计数率. 要测量光子的横向动量关联，去掉 PBS 前的透镜，代以在每一个臂上各放一个透镜，透镜距狭缝平面距离为 f(焦距)(图 1.54(b)). 这两个透镜将横向动量映射为横向位置，使具有横向动量$\hbar k_\perp$的光子聚集在狭缝平面后落在 $fk_\perp/k$ 处. 将一个狭缝固定，移动另一个狭缝以得到符合计数率分布.

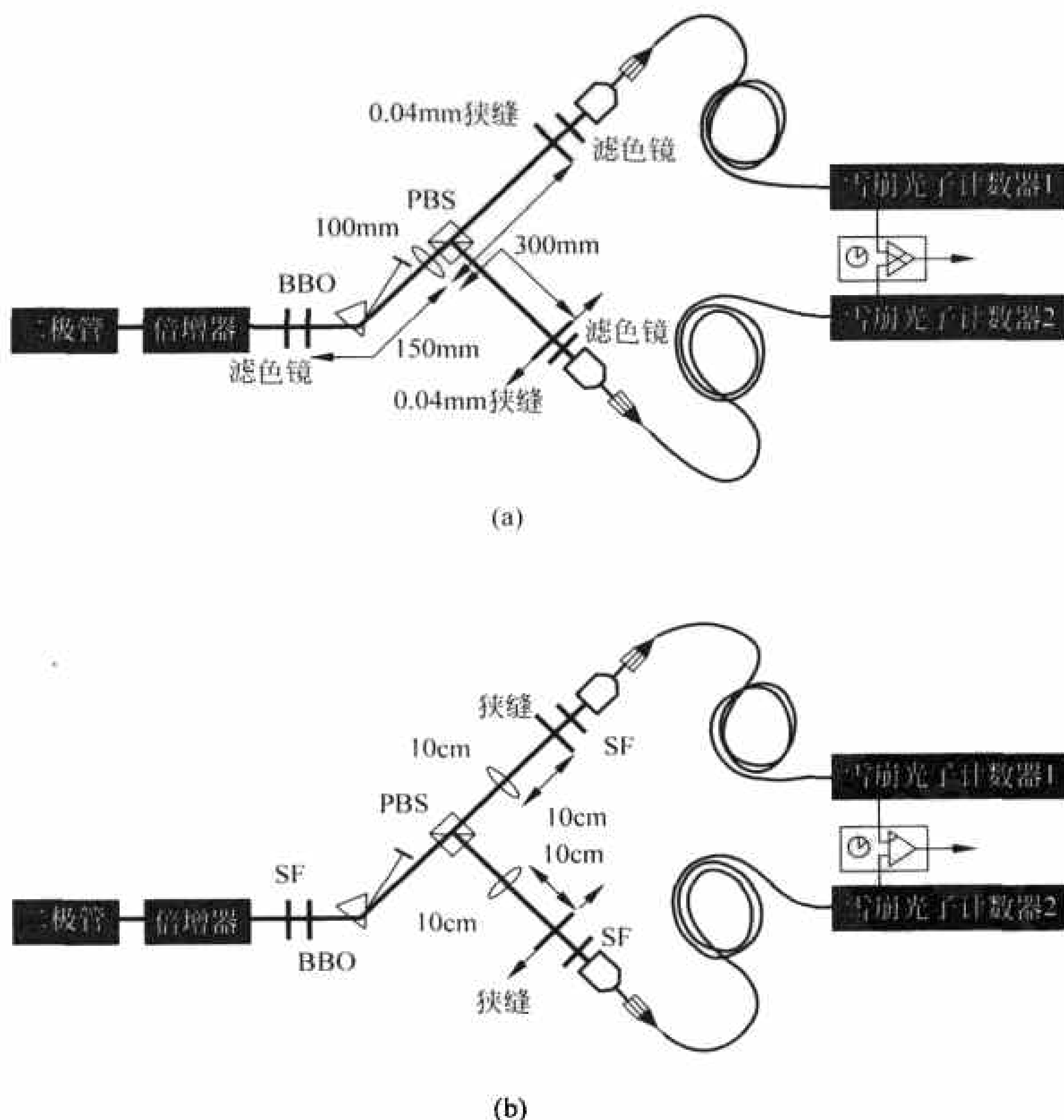


图 1.54 测量光子关联的实验装置示意图. 取自[63]

归一化符合分布后，得到条件几率函数为 $P(x_2|x_1)$ 和 $P(p_2|p_1)$，绘于图 1.55.

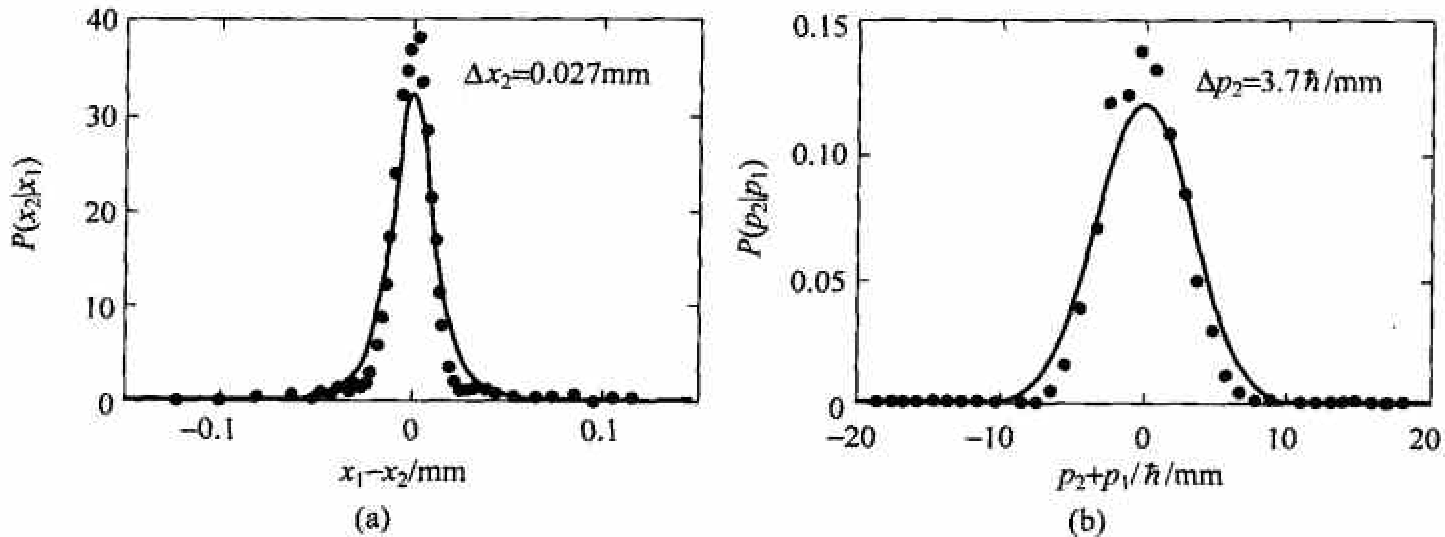


图 1.55　条件几率分布函数. 取自[63]

这些条件几率密度函数就用以计算在给定光子 1 的位置或动量条件下光子 2 的位置和动量不确定性：

$$\left.\begin{aligned}(\Delta x_2|_{x_1})^2 &= \int x_2^2 P(x_2|x_1)\mathrm{d}x_2 - \left(\int x_2 P(x_2|x_1)\mathrm{d}x_2\right)^2,\\(\Delta p_2|_{x_1})^2 &= \int p_2^2 P(x_2|x_1)\mathrm{d}x_2 - \left(\int p_2 P(x_2|x_1)\mathrm{d}x_2\right)^2.\end{aligned}\right\}\tag{1.10.46}$$

实验数据给出

$$(\Delta x_2|_{x_1})^2(\Delta p_2|_{p_1})^2 = 0.01\,\hbar^2.\tag{1.10.47}$$

这个结果证实了光子的关联是如此之好，而 EPR 定域要求被破坏得如此厉害. 但不要把关系(1.10.47)当作不确定性关系，因为均方差值是在不同条件下计算的. 不确定性关系 $(\Delta x_2)^2(\Delta p_2)^2 \geqslant \hbar^2/4$ 并未破坏，两个均方差值同时为零不可能在任何量子状态上实现. 对于可分离态用联合几率 $P(x_1,x_2)$ 和 $P(p_1,p_2)$ 计算均方差，得到的结果是 $[\Delta(\hat{x}_1+\hat{x}_2)]^2[\Delta(\hat{p}_1-\hat{p}_2)]^2 \geqslant \hbar^2$.

1.10.6　单光子的非定域性

在 1.8 节中讨论的 Bell 不等式实验检验涉及两个缠绕粒子的关联. 考虑一个单个光子打到分束器上. 它反向和透射的几率幅相等. 状态由下式描述：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[|1\rangle_T|0\rangle_R + |0\rangle_T|1\rangle_R]\tag{1.10.48}$$

此处 T(R)指分束器的透射(反射)臂. 以光子数状态为基，T 和 R 的关联互相排斥：如在 T 臂探测器计数，R 臂的探测器必然无反应，反之亦然. 但这并非我们感兴趣的量子力学关联(它涉及和量子数互补的相位.)将式(1.10.48)和式(1.8.6)Bell 基比较，可以看出它们在数学上是同构的. 意思是一个光子也可以用来检验 Bell 不等式，只要把一个相位适当安排进去. 此时 T 和 R 臂的探测器可以表明单个光子的两个"版本"之间的关联，即使探测器相距很远. 实验研究是由 S. M. Tan, D. F. Walls 和 M. J. Collett[64]建议的. 式(1.8.6)光子对的关联可以通过调整起偏器角度设置来量测.

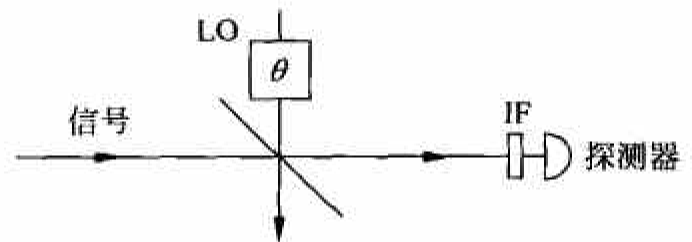


图 1.56　信号光子与局域振子(LO)产生光子的混合. 取自[65]

单光子和局域振子在分束器上混合(图 1.56),探测器不能判断探测到的光子是来自信号(单光子)还是来自振子所产生的相干态光子 $\alpha e^{i\theta}$. 相位 θ 起着在 1.8 节中起偏器角度的作用. 实验研究由 B. Hessmo 等人[65]完成. 他们对 Tan, Walls 和 Collett[64]的原始建议作了一些改动,试验安排示于图 1.57. 激光源产生 fs 脉冲,波长 90nm,它泵浦一个 BBO 下转换晶体. 辅助光子进入探测器 D_T. D_T 收到光子就说明下转换光子对中的另一个信号光子即将进入分束器. 局域振荡的产生由主激光器分出一束来驱动. 设置并调整延迟线,保证振子的光子和信号光子同时达到分束器. 强度控制使振子光强度和信号强度相匹配以得到高度关联测量可见度. 振子光子的极化调整为和信号光子的极化正交. 振子光子的相位由一臂的双折射晶体沿其光轴的转动来调整. D_1, D_2 和 D_T 的三重符合作为两臂相位差的函数记录下来,如图 1.58 所示. 如信号光子或振子光子遗失,会得到平坦的与相位无关的关联曲线. 用这个本底关联来修正关联-相移曲线,得到了可见度 91%±3%. Bell 不等式被破坏达到 71%. 如[64]指出的,这个关联是纯量子力学的,其结果不同于经典波动理论,更不用说经典微粒理论了.

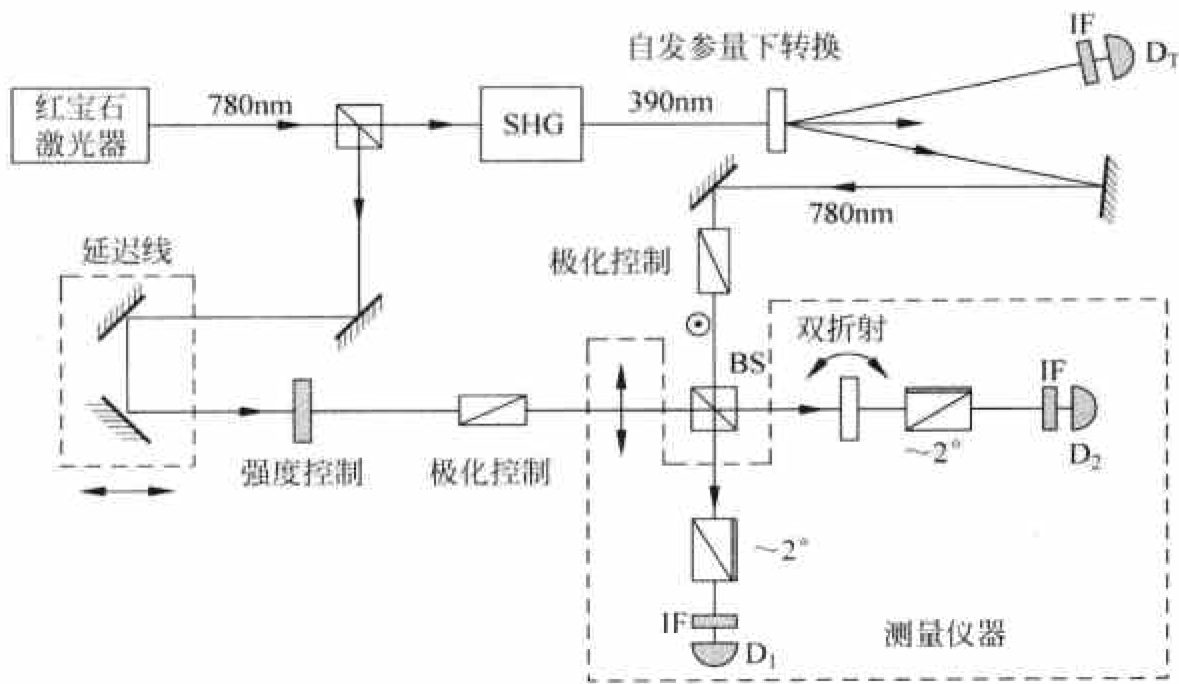


图 1.57 实验安排:参量下转换的一个单光子与局域振子的光子在分束器上混合. 在分束器的输出两臂各有一个探测器. 取自[65]

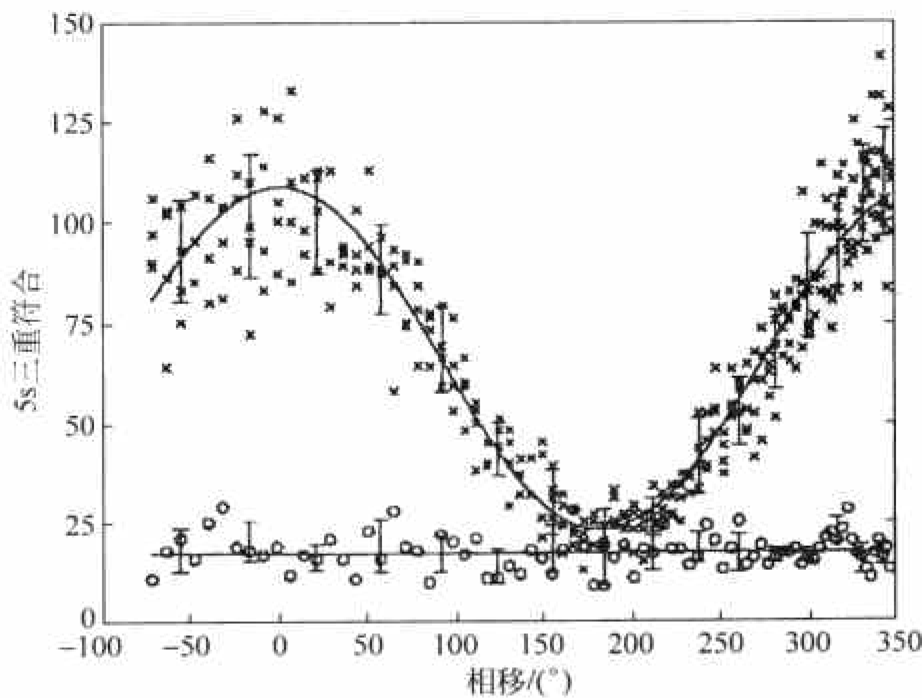


图 1.58 实验数据和曲线拟合. 振荡曲线表明单光子两个"版本"的非经典关联(作为相移的函数). 取自[65]

1.11　量子非破坏性实验简介

科学与技术的发展需要愈来愈高的精确度，例如引力波探测、压缩光、单原子阱等. 在计算机科学的信息处理与传递中，量子测量也是重要的. 量子测量的理论也需要发展从而满足这些需要. 量子非破坏性实验(quantum non-demolition experiment，简称 QND 实验)及回避反作用实验(back action evading experiments，简称 BAE 实验)都能在不确定原理这一基础性约束的制约之下提供最佳结果[66]. 我们从一个例子开始. 引力波探测器是由重以吨计的 Al(Si,Nb)棒构成，它们在经过的引力波驱动之下以极小的振幅(估计为 $\delta x\approx 10^{-19}$ cm)振动. 如果要求如此之高的精确度，那么这样巨大的金属棒也要用量子力学处理. 测量的重复频率是 $\tau\approx 10^{-3}$ s. 如果从测量振动的振幅来测引力波，则相应 Δx 会有动量的扰动 $\Delta p\geqslant \frac{\hbar}{2\Delta x}$，亦即有速度不确定性 $\Delta v\geqslant\frac{\hbar}{2m\Delta x}$. 它在时间 τ 内引起位置的不确定性 $(\Delta x)'\geqslant\frac{\hbar\tau}{2m\Delta x}$. 代入 $\Delta x=10^{-19}$ cm，$m=10\text{t}=10^7$ g，得 $(\Delta x)'\geqslant 5\times 10^{-19}$ cm，大于位置测量要求的精确度. 这样下一次测量就无法以需要的精度完成. 将棒做得更重是不现实的，使测量时间间隔再小会减弱引力波信号. 所以造成这种情况，是因为位置测量是一种仪器对体系的反作用(back action)，它带来对动量(位置的共轭力学量)的干扰. 这种沾污被反馈回体系，在它的演化中造成附加的位置误差，破坏了下一次精确测量位置的可能性. 我们能否更聪明一点呢？尝试测量金属棒在引力波驱动下获得的动量. 令动量测量所需的精确度为 $\Delta p\approx 10^{-9}\,\text{g}\cdot\text{cm/s}$. 相应的位置测量的不确定性为 $\Delta x>\frac{\hbar}{2\Delta p}\approx 5\times 10^{-19}$ cm. 在 $\tau\approx 10^{-3}$ s 后再进行动量测量. 由于悬挂的金属棒在很短的时间(远小于振荡周期)内可以认为是自由的，它的动量是守恒的. 不确定 Δx 不能由于自由演化引发新的动量不确定性 $(\Delta p)'$，因此，下一次动量测量仍能以同样精确度进行. 当然，一次次动量测量会使位置不确定积累，但这不会带来不利影响. 另外，引力波是会使金属棒动量变化的，测量动量以判断引力波强度正是基于此点. 但这是外力脉冲，体系的动力学演化仍是自由物体的. 在自由物体演化中动量是守恒的，沾污不能反馈进来. 基于以上讨论，自由物体的动量测量可以是量子非破坏性的，而位置测量则不是. 或称自由运动的动量是量子非破坏性的可观测量，而位置不是. 综上所述，在位置测量中 $\delta x=p\tau/m$，p 的不确定性通过这个关系产生 x 的新不确定性. 在自由运动中 $p=\text{const}$ 与 x 无关，因而动量测量产生的 x 的不确定性反馈不进来. 在此，运动常数是起决定作用的.

1.11.1　标准量子极限与反作用回避(BAE)实验

考虑一个自由粒子. 设在 $t=0$ 时进行的位置测量不确定值是 $(\Delta x)_1$. 相应的仪器反作用带来动量不确定值是 $(\Delta p)_{ba}=\frac{\hbar}{2(\Delta x)_1}$. 记 $(\Delta x)_2$ 为在时间 $t=\tau$ 进行的位置测量误差. 在 τ 时间内反馈的沾污造成位置不确定值是

$$(\Delta x)'=\frac{(\Delta p)_{ba}\tau}{m}=\frac{\hbar\tau}{2m(\Delta x)_1}.$$

两次位置测量可以定出动量的值

$$p = m\frac{x_2 - x_1}{\tau}. \tag{1.11.1}$$

动量的不确定值为

$$\Delta p = \frac{m}{\tau}\left[(\Delta x)_1^2 + \frac{\hbar^2\tau^2}{4m^2(\Delta x)_1^2} + (\Delta x)_2^2\right]^{1/2}. \tag{1.11.2}$$

$(\Delta x)_1$ 取什么值才能使 Δp 尽量地小呢？简单的计算给出

$$(\Delta x)_{1\,\min} = \sqrt{\frac{\hbar\tau}{2m}} \equiv \Delta x_{\mathrm{SQL}}. \tag{1.11.3}$$

它使由 $(\Delta x)_1$ 所导致的 $\Delta p = \sqrt{\frac{\hbar m}{\tau}}$. 定义

$$\Delta p_{\mathrm{SQL}} = \sqrt{\frac{\hbar m}{2\tau}}. \tag{1.11.4}$$

式(1.11.3)和式(1.11.4)定义了 x 和 p 误差的“标准量子极限”(standard quantum limit)，简称 SQL. 式(1.11.4)的定义有一定任意性，它满足

$$\Delta x_{\mathrm{SQL}}\Delta p_{\mathrm{SQL}} = \frac{\hbar}{2}.$$

式(1.11.2)中的 Δp 显然比 Δp_{SQL} 大，但属同量级. 这两个量的关系用符号 $\gtrsim$ 表示，即有

$$\Delta p \gtrsim \Delta p_{\mathrm{SQL}} \tag{1.11.5}$$

再考虑谐振子

$$\begin{aligned} x(t) &= x(0)\cos\omega t + \frac{p(0)}{m\omega}\sin\omega t \\ &\equiv x_1\cos\omega t + x_2\sin\omega t. \end{aligned} \tag{1.11.6}$$

x_1 和 x_2 称为谐振子的“求积振幅”(quadrature amplitude)，它们实际上是两个积分常数. 从 x 和 p 间的不确定关系可知，确定求积振幅的精确度需满足

$$\Delta x_1\Delta x_2 \geqslant \frac{\hbar}{2m\omega}. \tag{1.11.7}$$

如果它们有相同的精确度，则有

$$\Delta x_1 = \Delta x_2 \geqslant \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \tag{1.11.8}$$

而标准量子极限就是

$$\Delta x_{\mathrm{SQL}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}. \tag{1.11.9}$$

谐振子的能量为

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2A^2 = \frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2 + x_2^2)^{\frac{1}{2}},$$

此处 A 是振幅. 如振幅为小量，则

$$\begin{aligned} \Delta E &= m\omega^2 A\Delta A_{\mathrm{SQL}} = m\omega^2\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \\ &= \sqrt{\hbar\omega E}. \end{aligned} \tag{1.11.10}$$

标准量子极限可以逾越吗？答案是肯定的. 在得到这个极限时用了不确定关系，但二者不是等同的. 标准量子极限和如何进行测量有关. 以谐振子为例，它的能量决定于振幅 A，而和相角 ωt 无关. 测量求积振幅时，振幅和相角都要测. 关于相角的信息对能量是没有用的，但仪

器在测量相角时对体系的反作用会被反馈回体系造成附加的能量不确定性. 因此测量能量最好的办法是不要任何关于相角的信息. 这是 P. N. Lebedev 的办法：通过测量辐射压力的办法获得辐射能量密度. 可以用很长的时间来完成测量,相角的信息是不相干的. 在尺度为 d 的腔体中用可移动的壁(动量不确定性 Δp)测电磁能量 E,其不确定性为

$$\Delta E \approx \frac{d}{\tau}\Delta p, \tag{1.11.11}$$

此处 τ 是测量时间. 如用足够长的时间进行很精确的动量测量,可以使 ΔE 足够小,小于标准量子极限. 这类实验称为反作用回避(BAE)实验. BAE 的条件可以从考虑体系和测量仪器间的相互作用得到. 体系的可观测量 $\hat{A}$ 和仪器的可观测量 $\hat{M}$（即仪器的读出）耦合 Hamilton 量记为 $\hat{H}_\mathrm{I}$：

$$\hat{H}_\mathrm{I} = f(\hat{A},\hat{M}). \tag{1.11.12}$$

这个相互作用正是仪器对体系的反作用,它通过量子运动方程导致 $\hat{A}$ 的变化：

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\hat{H}_\mathrm{I},\hat{A}]. \tag{1.11.13}$$

因此,如果 $\hat{A}$ 和 $\hat{H}_\mathrm{I}$ 对易,则在测量中对 $\hat{A}$ 就没有反作用. 如果 $\hat{H}_\mathrm{I}$ 中不含体系的任何与 $\hat{A}$ 不对易的可观测量,它就和 $\hat{A}$ 对易,即 $\hat{H}_\mathrm{I}$ 不会导致 $\hat{A}$ 的本征态间的跃迁. 以上粗略的讨论在文献[66]中有严格的证明.

1.11.2 量子非破坏性(QND)实验

可观测量 $\hat{A}$ 的 QND 实验是对 $\hat{A}$ 的一系列精确测量,在各次测量之间的演化中没有与 $\hat{A}$ 不对易的可观测量的污染反馈给 $\hat{A}$. 只有很特殊的可观测量才能对污染反馈有免疫性. 它们被称为 QND 可观测量. 如果,且只有如果系统在 Heisenberg 图画中自由演化时在不同时间的 $\hat{A}(t)$ 算符对易,即

$$[\hat{A}(t_i),\hat{A}(t_j)] = 0, \quad t_i \neq t_j, \tag{1.11.14}$$

$\hat{A}$ 就是 QND 可观测量. 为了强调 QND 测量的重要性,仍以引力波探测为例. 这个探测需要多次在不同时间重复对一个可观测量进行测量. 如果我们有大量同样的系统处于相同状态,就可以在不同时间对许多系统进行测量,不必考虑一次测量对一个系统以后演化的影响. 但对于引力波探测器,系统是唯一的. 只能对一个棒多次进行测量,因此要求这些测量彼此不相干扰. QND 测量是绝对必须的. 令 $\hat{A}$ 为 QND 可观测量. 在 Heisenberg 图画中,在 t_0 时的测量得到 $A(t_0)$. 这个测量制备了状态 $|\psi_0\rangle$,它是 $\hat{A}(t_0)$ 的本征态,相应本征值 $A(t_0)$. 由于 $\hat{A}(t_0),\hat{A}(t_1),\hat{A}(t_2),\cdots$ 彼此对易,$|\psi_0\rangle$ 也是 $\hat{A}(t_1),\hat{A}(t_2),\cdots$ 的本征态,相应本征值 $A(t_1)$,$A(t_2),\cdots$. 即从第一次测量的结果就可以计算出以后任何时间的本征值. 在时间 $t_1,t_2,\cdots$ 进行的完全后继测量必须给出已知的本征值. 这里至关重要的是以下两个关系：

$$[\hat{A}(t),\hat{H}_\mathrm{I}] = 0, \tag{1.11.15}$$

$$[\hat{A}(t_i),\hat{A}(t_j)] = 0, \quad t_i \neq t_j. \tag{1.11.16}$$

第一个关系保证在测量时没有仪器对可观测量的反作用. 当然对其他可观测量,例如 $\hat{C}$,不

满足式(1.11.15)将受到反作用而遭污染.第二个关系保证被污染的可观测量$\hat{C}$等不会在体系的自由演化(此时仪器的相互作用已关闭)中将污染馈送给$\hat{A}$. C. M. Caves[67]等针对引力波探测的实际需要($\hat{H}_1$不关闭)研究了$\hat{A}$仍然成为QND可观测量的条件.引力波探测器是要通过测量判断作用于棒上的力$F(t)$.在此过程中动量要随时间变化.在理论上和实验上都还有许多进一步的讨论[68].但从量子力学最基础的要求而言,式(1.11.15)与式(1.11.16)给出的两个关系是必须满足的.

参考文献

[1] Feynman R P, Leighton R B, Sands M. The Feynman Lectures on Physics. Vol Ⅲ. Reading: Addison-Wesley, 1965, 1-1~1-9.

[2] Zeilinger A, Gaehler R, Shull C G, Treimer W, Faber J Jr. Proceedings of the Conference on Neutron Scattering. New York: AIP, 1982; Rev Mod Phys, 1988, 60: 1067.

[3] Tonomura A, Endo J, Matsuda T, Kawasaki T, Ezawa H. Am J Phys, 1989, 57: 117.

[4] Chapman M S, Hammond T D, Lenef A, Schmiedmeyer J, Rubinstein R A, Smith E, Pritchard D E. Phys Rev Lett, 1995, 75: 3783.

[5] Durr S, Nonn T, Rempe G. Nature, 1998, 395: 33.

[6] Cohen-Tannoudji C. Atoms in Electromagnetic Fields. Singapore: World Scientific, 1994, 343-348.

[7] Kunze S, Durr S, Rempe G. Europhys Lett, 1996, 34: 343.

[8] Scully M O, Englert B-G, Walther H. Nature, 1991, 351: 111.

[9] Englert B-G, Fearn H, Scully M O, Walther H. In: Quantum Interferometry. De Martini F, Denardo G, Zeilinger A. eds. Singapore: World Scientific, 1994.

[10] Storey P, Tan S, Collett M, Walls D. De Martini F, Denardo G, Zeilinger A. In: Quantum Interferometry. De Martini F, Denardo G, Zeilinger A, eds. Singapore: World Scientific, 1994.

[11] Grangier P, Roger G, Aspect A. Europhys Lett, 1986, 1: 173.

[12] Dirac P A M. Quantum Mechanics. 4th edition. Oxford: Clarendon Press, 1958. p. 9.

[13] Forrester A T, Gudmundsen R A, Johnson P O. Phys Rev, 1955, 99: 1691.

[14] Brown R H, Twiss R Q. Nature, 1956, 178: 1046.

[15] Pfleeger R L, Mande L. Phys Rev, 1967, 159: 1084.

[16] Paul H. Rev Mod Phys, 1986, 58: 209.

[17] Mandel L. Phys Rev, 1964, 134: A10.

[18] Horne M A, Shimony A, Zeilinger A. Phys Rev Lett, 1989, 19: 2209.

[19] Greenberger D M, Horne M A, Zeilinger A. Phys Today, 1993, 46(8): 22.

[20] Burnham D C, Weinberg D L. Phys Rev Lett, 1970, 25: 84.

[21] Hong C K, Mandel L. Phys Rev, 1985, A31: 2409.

[22] Hong C K, Ou Z Y, Mandel L. Phys Rev Lett, 1987, 59: 2044.

[23] Legero T, Wilk T, Hennrich M, Rempe G, Kuhn A. Phys Rev Lett, 2004, 93: 070503.

[24] Mandel L. Phys Rev, 1983, A28: 929.

[25] Franson J D. Phys Rev Lett, 1989, 62: 2205.

[26] Kwiat P G, Steinberg A M, Chiao R Y. Phys Rev, 1993, A47: R2472.

[27] Tittel W, Brendel J, Gisin B, Herzog T, Zbinden H, Gisin N. Phys Rev, 1998, A57: 3229.

[28] Zou X Y, Wang L J, Mandel L. Phys Rev Lett, 1991, 67: 318.

[29] Kwiat P G, Steinberg A M, Chiao R Y. Phys Rev, 1992, A45: 7729.

[30] Kim Y-H, Yu R, Kulik S P, Shih Y, Scully M O. Phys Rev Lett, 2000, 84: 1.
[31] Einstein A, Podolsky B, Rosen N. Phys Rev, 1935, 47: 777.
[32] Bohm D, Quantum Theory. Englewood Cliffs: Printice Hall, 1951.
[33] Bohr N. Phys Rev, 1935, 48: 696.
[34] Rosenfeld L. The Wave-Particle Dilemma. Mehra J, Dordrecht, Reidel D. The Physicist's Conception of Nature, 1973.
[35] Bell J S. Rev Mod Phys, 1966, 38: 447.
[36] Bell J S. Physics, 1965, 1: 195.
[37] Clauser J F, Shimony A. Rep Prog Phys. 1978, 41: 1881.
[38] Bell J S, D'espagnat B. In: Foundations of Quantum Mechanics. D'Espagnat B, ed. New York and London: Academic, 1971.
[39] Clauser J F, Horne M A, Shimony A, Holt R A. Phys Rev Lett, 1969, 23: 880.
[40] Freeman S J, Clauser J F. Phys Rev Lett, 1972, 28: 938.
[41] Holt R A, Pipkin F M. Harvard Preprint, 1973.
[42] Clauser J F. Phys Rev Lett, 1976, 36: 1223.
[43] Fry E S, Thompson R C. Phys Rev Lett, 1976, 37: 465.
[44] Aspect A, Grangier P, Roger G. Phys Rev Lett, 1981, 47: 460; 1982, 49: 91.
[45] Kwiat P G, Eberhard P H, Steinberg A M, Chiao R Y. Phys Rev, 1994, A49: 3209.
[46] Kwiat P G, Mattle K, Weinfurter H, Zeilinger A, Sergienko A V, Shih Y. Phys Rev Lett, 1995, 75: 4337.
[47] Wheeler J A. In: Mathematical Foundations of Quantum Theory. Marlow A R, ed. New York and London: Academic, 1978.
[48] Hellmuth T, Walther H, Zajonc A, Schleich W. Phys Rev, 1987, A35: 2532.
[49] Feynman R P. Int J Theor Phys, 1982, 21: 471.
[50] Greenberger D M, Horne M A, Zeilinger A. In: Kafatos M Bell's Theorem, Quantum Theory and Conception of the Universe. Dordrecht: Kluwer Academic, 1989.
[51] Greenberger D M, Horne M A, Shimony A, Zelinger A. Am J Phys, 1990, 58: 1131.
[52] Mermin N D. Am J Phys, 1990, 58: 731; Phys Today, 1990, 43(6): 9.
[53] Hardy L. Phys Rev Lett, 1992, 68: 2981; 1993, 71: 1665.
[54] Jordan T F. Phys Rev, 1994, 50: 62.
[55] Goldstein S. Phys Rev Lett, 1994, 72: 1951.
[56] Torgerson J R, Branning D, Monken C H, Mandel L. Phys Lett, 1995, A204: 323.
[57] Torgerson J R, Branning D, Mandel L. App Phys, 1995, B60: 267.
[58] Zelinger A, Horne M A, Weinfurter H, Zukowski M. Phys Rev Lett, 1997, 78: 3031.
[59] Bouwmeester D, Pan J-W, Daniell M, Weinfurter H, Zeilinger A. Phys Rev Lett, 1999, 82: 1345.
[60] Pan J-W, Bouwmeester D, Daniell M, Weinfurter H, Zeilinger A. Nature, 2000, 403: 515.
[61] Duan L-M, Giedke G, Cirac J I, Zoller P. Phys Rev Lett, 2000, 84: 2722.
[62] Manchini S. Giovannetti V, Vitali D, Tombesi P. Phys Rev Lett, 2002, 88: 120 401.
[63] Howell J C, Bennick R S, Bentley S J, Boyd R W. Phys Rev Lett, 2004, 92: 210 403.
[64] Tan S M, Walls D F, Collett M J. Phys Rev Lett, 1991, 66: 252.
[65] Hessmo B, Usachev P, Heydari H, Bjork G. Phys Rev Lett, 2004, 92: 180 401.
[66] Braginsky V B, Khalili F Y. Quantum Measurement. Cambridge: Cambridge University Press, 1992.
[67] Caves C M, Thorne K S, Drever R M P, Sandberg V D, Zimmermann M. Rev Mod Phys, 1980, 52: 341.
[68] Braginsky V B, Vorontsov Y I, Thorne K S. Science, 1980, 209: 547.

第2章
量子缠绕及其对量子信息和量子计算的应用

量子计算的概念是从20世纪80年代初开始的. 1982年P. Benioff[1]提出计算机在原则上可以用纯粹量子的方式运行. 量子计算机会出错误,纠错会有不少麻烦. 既然如此,它比经典计算机又有什么优越之处呢? 经典计算机能存储矢量并旋转它们,将它们投影到正交基上,等等. 实际上它也可以模拟量子过程,但当 Hilbert 空间变得很大时,模拟效率变得越来越低. 1982年 Feynman 指出,量子计算机模拟起量子过程来要容易得多,因此可以完成某些经典计算机所无法完成的任务. 如果量子计算机有并行结构,它就可以实时模仿任何量子体系,不论其大小如何. 相形之下,经典计算机模拟量子体系,所需的步骤要随体系的大小和演化时间长短指数增加. 特别在20世纪90年代,量子信息与量子计算有了迅速发展. 本章着重介绍与量子信息和量子计算关系密切的量子缠绕的基本性质,也要介绍一些量子信息的基本概念. 在量子信息与量子计算方面已有不少详细的评述文章,也有了专著[3,4]. 本章内容参考最多的是 J. Preskill 的讲义[5].

2.1 量子计算简介

2.1.1 量子数据及数据处理

经典比特用两个状态0和1代表. 例如可以记为$|0\rangle$和$|1\rangle$. 经典n-比特用一串n个比特代表,每个比特可能是0或1,n-比特总共有2^n个不同的状态,从000…0到111…1. 量子比特(q比特)可以用两能级的微观体系实现,例如原子、核自旋或光子极化. 量子比特和经典比特特征最大的不同在于它可以是$\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$状态,$\alpha$和$\beta$是复数并且满足$|\alpha|^2+|\beta|^2=1$. 一对量子比特(2-q比特)可以是 Bool 比特$|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$和$|11\rangle$四者之一,但也可能是它们的组合,例如

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle+|01\rangle)=|0\rangle\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle). \tag{2.1.1}$$

这是一个直积态(可分离为两个q比特的乘积). 下面的q比特则是不能表示为乘积的组合

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle+|11\rangle), \tag{2.1.2}$$

它是不能分离的,称为缠绕态. 一串n-量子比特(n-q比特)可以表示为

$$\psi = \sum_{x=(00\cdots0)}^{(11\cdots1)} c_x \mid x\rangle, \tag{2.1.3}$$

此处 c_x 是复数,满足

$$\sum\nolimits_x \mid c_x \mid^2 = 1. \tag{2.1.4}$$

n—q 比特的量子态用 2^n 维 Hilbert 空间的一个矢量代表,每一维都是一个经典状态.

经典计算可以表示为一系列的 1-比特和 2-比特操作,例如 NOT 门(非门)和 AND 门(与门). 1-比特操作的 NOT 门是状态的翻转,即 $0\to1,1\to0$. 作用于 a 和 b 的 AND 操作记为 $x=a\wedge b$,定义为仅当 a,b 都为 1 时 $x=1$,否则 $x=0$. 量子计算也类似地表示为一系列的 1-q 比特和 2-q 比特量子门. 1-q 比特状态表示为

$$\begin{pmatrix} \mid 0\rangle \\ \mid 1\rangle \end{pmatrix},$$

作用在它上面的量子门是幺正矩阵

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix},$$

它将 $|0\rangle$ 映射为 $\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$,将 $|1\rangle$ 映射为 $\gamma|0\rangle+\delta|1\rangle$. Bool 态 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的经典对应是 0 和 1,但 $\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$ 却没有经典对应. 2-比特 Bool 态的第一个比特称为控制输入(controlled input),第二个比特称为靶输入(traget input). 如控制输入为 1,操作 CNOT(controlled NOT)将靶输入翻转,如控制输入为 0,则不做任何事. 它将 $|10\rangle$ 变为 $|11\rangle$,将 $|11\rangle$ 变为 $|10\rangle$,保持 $|00\rangle$ 和 $|01\rangle$ 不变. 对 2-q 比特,有

$$\text{CNOT}: \mid a,b\rangle \to \mid a, a\oplus b\rangle, \tag{2.1.5}$$

此处 $\oplus$ 是模为 2 的加法. 量子门 XOR(exclusive OR,异域门)定义为

$$U_{\text{XOR}} \mid x,0\rangle = \mid x,x\rangle. \tag{2.1.6}$$

它保持第 1 个 q 比特不变,而将第 2 个 q 比特改为第 1 个 q 比特的复制品. 复制行为使人不禁要尝试一下,作用在典型量子比特 $|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$ 上能否将它克隆? 尝试的结果是:

$$\mid\psi\rangle = \alpha \mid 0\rangle + \beta \mid 1\rangle, \tag{2.1.7}$$

$$\begin{aligned} U_{\text{XOR}} \mid \psi,0\rangle &= \alpha U_{\text{XOR}} \mid 0,0\rangle + \beta U_{\text{XOR}} \mid 1,0\rangle \\ &= \alpha \mid 0,0\rangle + \beta \mid 1,1\rangle, \end{aligned} \tag{2.1.8}$$

不等于预期的 $|\psi,\psi\rangle$,而是一个纠缠态. 这是对量子态普遍成立的"非克隆定理"的一个特例. 我们将在 2.3.3 节讨论这个定理.

任何作用在量子数据上的幺正算符都可以由 2-q 比特操作 XOR 或 CNOT 以及 1-q 比特的幺正操作 $\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$ 构成.

2.1.2 量子并行性与有效量子算法

D. Deutsch[6] 将 Feynman 的想法表述为更具体的形式. 从一个具体的例子开始. 函数 $f(x)$ 将一个 1-比特 x 变为另一个 1-比特 $f(x)$. 我们想要判断一下,$f(0)$ 和 $f(1)$ 是否相等. 经典计算机要分别计算 $f(0)$ 和 $f(1)$ 然后比较它们做出判断. 量子计算机能做得好些吗? 定义一个幺正变换 U_f:

$$U_f: \mid x\rangle \mid y\rangle \to \mid x\rangle \mid y\oplus f(x)\rangle. \tag{2.1.9}$$

如 $f(x)=1$,它将第 2 个 q 比特翻转,如 $f(x)=0$ 它就什么也不做. 如 $|y\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle-|1\rangle)$,就有

$$U_f:|x\rangle\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle-|1\rangle)\rightarrow|x\rangle\frac{1}{\sqrt{2}}(|f(x)\rangle-|1\oplus f(x)\rangle)$$
$$=|x\rangle(-1)^{f(x)}\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle-|1\rangle). \tag{2.1.10}$$

在此结果中,$f(x)$已不再是状态的标志,而集中到相因子中了. 令 $|x\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)$,有

$$U_f:\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle-|1\rangle)\rightarrow\frac{1}{\sqrt{2}}[(-1)^{f(0)}|0\rangle+(-1)^{f(1)}|1\rangle]\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle-|1\rangle). \tag{2.1.11}$$

将式(2.1.11)中右方第 1 个 q 比特投影到基 $|\pm\rangle$ 上:

$$|\pm\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle\pm|1\rangle), \tag{2.1.12}$$

如果是:如 $f(0)=f(1)$就得到 $|+\rangle$,如 $f(0)\neq f(1)$则得到 $|-\rangle$. 我们可以把量子计算机想象成一个黑匣子,将 q 比特和操作输入,它会进行计算,然后把结果投影到基 $\{|0\rangle,|1\rangle\}$上. 如投影给出$\{1,0\}$,则结果是 0;如投影给出$\{0,1\}$,则结果是 1. 在这个例子中,输入的 q 比特是 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle-|1\rangle)$,操作是 U_f. 和通常不同的是,投影的基是 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的两个线性组合$\{|+\rangle,|-\rangle\}$. 投影给出$\{1,0\}$,则 $f(0)=f(1)$;如给出$\{0,1\}$,则 $f(0)\neq f(1)$. 量子计算机完成计算只用了一步. 这个算法由 I. L. Chuang 等人[7]实现. 这是量子计算并行的一个例子,称为 Deutsch 问题. 该算法抽出了与 $f(0)$ 和 $f(1)$ 都有关的整体信息. 令 $f(x)$为 N-比特的函数,有 2^N 个可能的宗量. 如用经典计算机计算 $f(x)$的函数表,要进行 2^N 次计算. 在 N 大时,这是不可想象的. 用量子计算机执行

$$U_f:|x\rangle|0\rangle\rightarrow|x\rangle|f(x)\rangle, \tag{2.1.13}$$

输入以下状态

$$\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)\right]^N=\frac{1}{2^{N/2}}\sum_{x=0}^{2^N-1}|x\rangle. \tag{2.1.14}$$

运算 U_f 一次,可以生成下列状态:

$$\frac{1}{2^{N/2}}\sum_{x=0}^{2^N-1}|x\rangle|f(x)\rangle. \tag{2.1.15}$$

函数 f 的整体性质已经蕴藏在态式(2.1.15)中了. 巧妙地应用这个性质可以设计出强有力的算法. 其中著名的有:

(1) 大数的因子化[8]. 需要的时间是最好经典时间的对数的多项式. 指数式的加快是由于运用了一些并行计算路径的相毁干涉.

(2) 在未分类的数据库中寻找一个对象[9]. 这被称为"在草堆中寻一根针". 在 N 个外观相同的物体中要找一个特定的物体,平均需要找 $N/2$ 次才能有 1/2 的成功几率. 用缠绕的 q 比特,每一次寻找会影响下一个操作. 这样经过 $\sqrt{N}$ 次寻找就有 1/2 成功的机会. 这个

算法已经由 I. L. Chuang 等人[10]用核磁共振方法在实验上实现. 但这个方法的缠绕性质仍在进一步探讨,量子计算的威力发挥也在进一步研究[11].

(3) 量子模拟. 解决多体问题,经典计算机所需时间随粒子数增加而指数上升. S. Wiesner[12],D. Abrams 和 S. Lloyd[13]追随 Feynman 的想法,即量子计算机模拟量子系统没有困难,因为它们遵守的定律是完全一样的. 在量子计算机中根据 Hamilton 量设计的幺正变换作用于初态可以直接导致末态,不需要解 Schrödinger 方程. 这个办法远比在常规计算机上用数值方法解 Schrödinger 方程和 Monte Carlo 模拟要来的优越.

2.1.3 量子信息

在讨论缠绕的量度、量子数据压缩等实际问题时,都需要涉及经典及量子信息的基础概念. 在经典信息学中我们遇到的问题是: (1) 为了避免重复,一条信息可以压缩到什么程度; (2) 为了保护信息不被噪声带来的错误所破坏,需要多少冗余度(redundancy). C. Shannon 在 1948 年用熵的概念表征冗余度. 考虑一条有 n 个字符的信息,$n\gg1$,每个字符都从二进制的数 0 和 1 选出,先验几率分别是 p 和 $1-p$,$0\leqslant p\leqslant1$. 问题是能否用短一些的字串表达出基本相同的信息内容. 对 n 很大时,字串包含大约 $n(1-p)$个 0 和 np 个 1. 具有相同数目的 0 与 1 的不同字串共有$\binom{n}{np}$个. 从 Stirling 大数公式

$$\log n! = n\log n - n + O(\log n), \tag{2.1.16}$$

可得

$$\begin{aligned}\log\binom{n}{np} &= \log\frac{n!}{(np)!\,[n(1-p)]!} \\ &\simeq n\log n - n - [np\log np - np + n(1-p)\log n(1-p) - n(1-p)] \\ &= nH(p),\end{aligned} \tag{2.1.17}$$

此处

$$H(p) = -p\log p - (1-p)\log(1-p) \tag{2.1.18}$$

称为熵函数. 对数的底取为 2. 这类字串(称为典型字串)数目为 $2^{nH(p)}$ 个. 具有不同数目 0 和 1 的字串称为非典型字串,它们出现的几率在 $n\to\infty$时微乎其微. 由于 $0\leqslant p\leqslant1$ 情况下有 $0\leqslant H(p)\leqslant1$,用一串 $nH(p)$个字符来标明典型字串就够了. 对 $p=1/2$ 而言 $H(p)=1$,因此对 p 和 1/2 相差很多时,可以得到相当大程度的压缩. 以上的推论可以从 2 种字符推广到 k 种字符的字符集,字符 x 出现的几率是 $p(x)$. 有 n 个字符的字串,x 出现的几率是 $np(x)$,典型字串的数目是

$$\frac{n!}{\prod_x (np(x))!} \simeq 2^{nH(X)}, \tag{2.1.19}$$

此处

$$H(X) = \sum_x - p(x)\log p(x) \tag{2.1.20}$$

是字符系综 $X=\{x,p(x)\}$的 Shannon 熵. 这个系综中一个字符 x 平均携带信息 $H(x)$. 可以用$\{\varepsilon,\delta\}$表述把以上的推论变得更加明确. 一个特定的 n 字符信息 $x_1x_2\cdots x_n$ 出现的先验几率为

$$P(x_1\cdots x_n)=p(x_1)\cdots p(x_n),$$
$$\log P(x_1\cdots x_n)=\sum_{i=1}^{n}\log p(x_i). \tag{2.1.21}$$

中央极限定理给出

$$-\frac{1}{n}\log P(x_1\cdots x_n)\sim\langle-\log p(x)\rangle\equiv\frac{\sum_x-p(x)\log p(x)}{\sum_x p(x)}=H(X). \tag{2.1.22}$$

对任何 $\varepsilon,\delta>0$ 和 x 足够大，每个典型字串的几率 P 满足

$$H(X)-\delta<-\frac{1}{n}\log P(x_1\cdots x_n)<H(X)+\delta, \tag{2.1.23}$$

所有典型字串的总几率超过 $1-\varepsilon$. Shannon 的无噪声编码定理判定最佳编码能渐近地将每个字符压缩到 $H(x)$比特.

当信息传输通过有噪声通道时，收到信息中的 y 可能与送出信息中的 x 不同. 噪声通道由条件几率 $P(y|x)$表征，它代表送出 x 而收到 y 的几率. 对所有可能送出的 x，接收到 y 的几率是：

$$p(y)=\sum_x p(y\mid x)p(x). \tag{2.1.24}$$

在 y 被接受之后，x 的几率分布被刷新，根据 Bayes 规则，

$$p(x\mid y)=\frac{p(y\mid x)p(x)}{p(y)}. \tag{2.1.25}$$

刷新后的 x 分布不再是先验的了，它包括了在收到 y 之后的有关 x 的知识. 替代原有的熵函数，现在是条件熵：

$$H(X\mid Y)=\langle-\log p(x\mid y)\rangle, \tag{2.1.26}$$

它量化了用最佳编码时每个字符所携带的信息. 联合几率由下式给出：

$$p(x,y)=p(x\mid y)p(y)=p(y\mid x)p(x). \tag{2.1.27}$$

由此，$H(X|Y)$变为

$$H(X\mid Y)=\langle-\log p(x\mid y)\rangle=\langle-\log p(x,y)\rangle-H(y). \tag{2.1.28}$$

从另一方面看，

$$H(Y\mid X)=\langle-\log p(y\mid x)\rangle=\langle-\log p(x,y)\rangle-H(x). \tag{2.1.29}$$

由于知道了 Y，我们增获了有关 X 的信息. 要量化这个概念，我们在知道 Y 以后，标明 X 所需的每字符比特数的减少量：

$$\begin{aligned}I(X;Y)&\equiv H(X)-H(X\mid Y)=H(Y)-H(Y\mid X)\\&=H(X)+H(Y)-H(X,Y),\end{aligned} \tag{2.1.30}$$

它被称为相互信息(mutual information)，对 X 和 Y 是对称的. 可以证明

$$H(X)\geqslant H(X\mid Y)\geqslant 0,$$

因此 I 是非负的. $I(X;Y)$是当我们读了 Y 之后增获的关于 X 的每字符的信息量，反之亦然. 如果 $p(y|x)$表征一个噪声通道，$I(X;Y)$就是在给定先验几率分布 $p(x)$条件下每字符的信息量. 这就是 Shannon 的噪声通道编码定理. 当 X 与 Y 间没有关联时，有 $p(x,y)=p(x)p(y)$，因而 $I(X;Y)=0$，即我们知道 Y 对于了解和它没有关联的 X 毫无帮助.

上述的考虑可以推广到量子信息. 量子状态的系综是制备包含 n 个字符信息的源. 每个

字符由密度矩阵$\boldsymbol{\rho}_x$表征，先验几率为p_x. 系综的密度矩阵为

$$\boldsymbol{\rho}=\sum_x p_x\boldsymbol{\rho}_x, \tag{2.1.31}$$

它的 von Neumann 熵定义为

$$S(\boldsymbol{\rho})=-\operatorname{tr}(\boldsymbol{\rho}\log\boldsymbol{\rho}). \tag{2.1.32}$$

如选择了使$\boldsymbol{\rho}$对角化的正交归一基$\{|a\rangle\}$，则有

$$\boldsymbol{\rho}=\sum_a\lambda_a|a\rangle\langle a|, \tag{2.1.33}$$

以及

$$S(\boldsymbol{\rho})=\sum_a-\lambda_a\log\lambda_a=H(A), \tag{2.1.34}$$

此处H是系综$A\{a,\lambda_a\}$的熵函数.

当x包含相互正交的纯态时，量子源还原为经典源，$S(\boldsymbol{\rho})=H(x)$. 当状态$\boldsymbol{\rho}_x$不再是相互对易的，量子源变为非平庸的. von Neumann 熵起双重作用. 它量化量子信息内容，即可靠地编码信息所需的最小每字符信息量，也量化经典信息内容，即进行最好的测量时我们能获取的有关制备的最大每字符信息量(比特). 约化密度矩阵的 von Neumann 熵也表征二组分纯态的缠绕度.

2.2 量子缠绕

在讨论 Bell 定理时我们见到 EPR-Bell 态. 在对量子信息和量子计算的应用方面，在这里我们进一步剖析它们的一些性质.

2.2.1 缠绕态的密度矩阵表征

考虑一个包含子体系 A 与 B 的体系，由关联波函数描述：

$$|\psi\rangle=a|0\rangle_A\otimes|0\rangle_B+b|1\rangle_A\otimes|1\rangle_B, \tag{2.2.1}$$

此处$|0\rangle$与$|1\rangle$是正交的. 对 A 进行力学量M_A的测量. 对整个体系而言，它的算符是$M_A\otimes 1_B$，它在状态$|\psi\rangle$中的期望值是

$$\begin{aligned}\langle\psi|M_A\otimes 1_B|\psi\rangle&=(a_A^*\langle 0|\otimes_B\langle 0|+b_A^*\langle 1|\otimes_B\langle 1|)\\&\quad(M_A\otimes 1_B)(a|0\rangle_A\otimes|0\rangle_B+b|1\rangle_A|1\rangle_B)\\&=|a|_A^2\langle 0|M_A|0\rangle_A+|b|_A^2\langle 1|M_A|1\rangle_A,\end{aligned} \tag{2.2.2}$$

此处用了正交性

$${}_B\langle 0|1_B|1\rangle_B=0. \tag{2.2.3}$$

关系式(2.2.2)可以用密度矩阵$\boldsymbol{\rho}_A$表示：

$$\langle M_A\rangle=\operatorname{tr}(M_A\boldsymbol{\rho}_A), \tag{2.2.4}$$

$$\boldsymbol{\rho}_A=|a|^2|0\rangle_{AA}\langle 0|+|b|^2|1\rangle_{AA}\langle 1|. \tag{2.2.5}$$

上面的例子可以推广到任何两组分体系的任意状态，它的 Hilbert 空间是$H_A\otimes H_B$. 体系的任何纯态可以展开为

$$|\psi\rangle_{AB}=\sum_{i,\mu}a_{i\mu}|i\rangle_A\otimes|\mu\rangle_B, \tag{2.2.6}$$

并有

$$\sum_{i\mu} |a_{i\mu}|^2 = 1. \tag{2.2.7}$$

M_A 的期望值是

$$\begin{aligned}\langle M_A \rangle &= {}_{AB}\langle \psi | M_A \otimes 1_B | \psi \rangle_{AB} \\ &= \sum_{jv} a_{jv}^* ({}_A\langle j | \otimes {}_B\langle v |)(M_A \otimes 1_B) \sum_{i\mu} a_{i\mu} (| i \rangle_A \otimes | \mu \rangle_B) \\ &= \sum_{ijv} a_{jv}^* a_{iv} {}_A\langle j | M_A | i \rangle_A \\ &= \mathrm{tr}(M_A \boldsymbol{\rho}_A),\end{aligned} \tag{2.2.8}$$

此处①

$$\boldsymbol{\rho}_A = \mathrm{tr}_B | \psi \rangle_{AB\,AB} \langle \psi | = \sum_{ij\mu} a_{i\mu} a_{j\mu}^* | i \rangle_{A\,A} \langle j |. \tag{2.2.9}$$

$\boldsymbol{\rho}_A$ 可以对角化，它的本征值是非负的，本征值之和为 1：

$$\mathrm{tr}\boldsymbol{\rho}_A = \sum_{i\mu} |a_{i\mu}|^2 = 1. \tag{2.2.10}$$

令$\{\varphi_a\}$代表将$\boldsymbol{\rho}_A$ 对角化的基，有

$$\boldsymbol{\rho}_A = \sum_a p_a | \varphi_a \rangle \langle \varphi_a |, \tag{2.2.11}$$

此处 $0 < p_a \leqslant 1$ 以及 $\sum_a p_a = 1$. 如果$\boldsymbol{\rho}_A$ 只有一个非零的本征值，因此有$\boldsymbol{\rho}_A^2 = \boldsymbol{\rho}_A$，即$\boldsymbol{\rho}_A$ 所代表的是纯态. 否则 $\mathrm{tr}\boldsymbol{\rho}_A^2 < \mathrm{tr}\boldsymbol{\rho}_A$，状态是混合态，它包含态 φ_a 的非相干组合，$p_a \neq 0$. 体系的纯态 $|\psi\rangle_{AB}$并不一定意味着子体系 A 也是纯态. 只在无相互作用子体系直乘态$|\psi\rangle_{AB} = |\varphi\rangle_A \otimes |\chi\rangle_B$ 情况下才会如此. 当子体系 A 与子体系 B 相互作用，它们相互关联，或称缠绕，这就是在式(2.2.6)中遇到的情况. 即使相互作用只存在短暂时间，缠绕摧毁了子体系 A 状态间叠加的相干性，这就使得在对子体系 A 进行测量时，某些相对相位不能被测量出. 对二能级体系($|0\rangle$, $|1\rangle$)，2×2 密度矩阵可以用 Pauli 矩阵和单位矩阵表示：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\rho}(\boldsymbol{P}) &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 + P_3 & P_1 - \mathrm{i}P_2 \\ P_1 + \mathrm{i}P_2 & 1 - P_3 \end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{2.2.12}$$

由于 Pauli 矩阵是无迹的，$\mathrm{tr}\boldsymbol{\rho} = 1$ 的要求得以满足. 从式(2.2.12)可以得到

$$\det\boldsymbol{\rho} = \frac{1}{4}(1 - \boldsymbol{P}^2). \tag{2.2.13}$$

令$\boldsymbol{\rho}$ 的本征值为 p_1 和 p_2，由此 $\det\boldsymbol{\rho} = p_1 p_2$. $\boldsymbol{\rho}$ 具有非负本征值的必要条件是 $\boldsymbol{P}^2 \leqslant 1$. 这也是充分条件，因为 $\mathrm{tr}\boldsymbol{\rho} = p_1 + p_2$ 意味着 p_1 和 p_2 不可能都为负值. 此时 $\det\boldsymbol{\rho} \geqslant 0$ 就决定了 p_1 和 p_2 为非负. 在 $0 \leqslant |\boldsymbol{P}| \leqslant 1$ 条件下的矢量 $\boldsymbol{P}$ 的端点必须在半径为 1 的球内或球面上. 这个球称为 Block 球. 在球面上的点 $|\boldsymbol{P}| = 1$，即 $\det\boldsymbol{\rho} = 0$，$\boldsymbol{\rho}$ 的本征值为 0 和 1，它表征一个纯态. $\boldsymbol{P}$ 由单位矢量$\hat{\boldsymbol{n}} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$给出.

$$\boldsymbol{\rho}(\hat{\boldsymbol{n}}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{I} + \hat{\boldsymbol{n}} \cdot \sigma). \tag{2.2.14}$$

---

① $\mathrm{tr}\,|i\rangle\langle j| = \sum_k \langle k | i \rangle \langle j | k \rangle = \sum_k \langle j | k \rangle \langle k | i \rangle = \langle j | i \rangle$

$\boldsymbol{\rho}(\hat{\boldsymbol{n}})$满足关系

$$(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma})\boldsymbol{\rho}(\hat{\boldsymbol{n}})=\boldsymbol{\rho}(\hat{\boldsymbol{n}})(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma})=\boldsymbol{\rho}(\hat{\boldsymbol{n}}),\tag{2.2.15}$$

即$\boldsymbol{\rho}(\hat{\boldsymbol{n}})$是$\hat{\boldsymbol{n}}\boldsymbol{\sigma}$的本征态，本征值为1. 它可以被诠释为指向$\hat{\boldsymbol{n}}(\theta,\varphi)$方向的自旋. 这个态由以下本征自旋量表示：

$$|\psi(\theta,\varphi)\rangle=\begin{pmatrix}e^{-i\varphi/2}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ e^{i\varphi/2}\sin\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix}.\tag{2.2.16}$$

这可以由直接计算验证：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\rho}(\hat{\boldsymbol{n}})&=|\psi(\theta,\varphi)\rangle\langle\psi(\theta,\varphi)|\\&=\begin{pmatrix}\cos^2\dfrac{\theta}{2} & \cos\dfrac{\theta}{2}\sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi}\\ \cos\dfrac{\theta}{2}\sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi} & \sin^2\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix}\\&=\frac{1}{2}\boldsymbol{I}+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}\\&=\frac{1}{2}(\boldsymbol{I}+\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}).\end{aligned}\tag{2.2.17}$$

2.2.2　Schmidt 分解

二组分纯态可以表示为如式(2.2.6)那样的标准形式，称为 Schmidt 分解：

$$|\psi\rangle_{AB}=\sum_{i\mu}a_{i\mu}|i\rangle_A|\mu\rangle_B,\tag{2.2.18}$$

定义另一组基：

$$|\tilde{i}\rangle_B=\sum_{\mu}a_{i\mu}|\mu\rangle_B,\tag{2.2.19}$$

它不一定是正交归一的. 因此

$$|\psi\rangle_{AB}=\sum_i|i\rangle_A|\tilde{i}\rangle_B.\tag{2.2.20}$$

此处$\tilde{i}$与式中的求和指标i有一一对应关系. 假定基$\{|i\rangle_A\}$使$\boldsymbol{\rho}_A$对角化：

$$\boldsymbol{\rho}_A=\sum_i p_i|i\rangle_{AA}\langle i|.\tag{2.2.21}$$

另一方面可以对B取迹得到$\boldsymbol{\rho}_A$：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\rho}_A&=\mathrm{tr}_B(|\psi\rangle_{AB\,AB}\langle\psi|)\\&=\mathrm{tr}_B\Big(\sum_{ij}|i\rangle_{AA}\langle j|\otimes|\tilde{i}\rangle_{BB}\langle\tilde{j}|\Big)\\&=\sum_{ij}{}_B\langle\tilde{j}|\tilde{i}\rangle_B(|i\rangle_{AA}\langle i|).\end{aligned}\tag{2.2.22}$$

比较式(2.2.21)与式(2.2.22)得到

$${}_B\langle\tilde{j}|\tilde{i}\rangle_B=p_i\delta_{ij},\tag{2.2.23}$$

基$\{|\tilde{i}\rangle_B\}$是正交的，但未归一. 定义

$$|i'\rangle_B=\sqrt{p_i}\,|\tilde{i}\rangle_B,\tag{2.2.24}$$

使基$\{|\tilde{i}'\rangle_B\}$正交归一，就得到 Schmidt 分解的标准形式.

$$|\psi\rangle_{AB}=\sum_i p_i\,|i\rangle_A\,|i'\rangle_B. \tag{2.2.25}$$

系数$\{\sqrt{p_i}\}$称为 Schmidt 系数，而$\boldsymbol{\rho}_A$与$\boldsymbol{\rho}_B$非零本征值的数目称为 Schmidt 数.

一般来说两个不同的纯态$|\psi\rangle_{AB}$和$|\varphi\rangle_{AB}$不能用H_A与H_B的相同正交归一化基来展开. 从式(2.2.23)开始，对 A 取迹，得到

$$\boldsymbol{\rho}_B=\mathrm{tr}_A\,|\psi\rangle_{AB\,AB}\langle\psi|=\sum_i p_i\,|i'\rangle_{BB}\langle i'|. \tag{2.2.26}$$

我们看到$\boldsymbol{\rho}_A$与$\boldsymbol{\rho}_B$共享相同的非零本征值. 因为H_A与H_B可以有不同的维数，它们的零本征值数可能不同. 如$\boldsymbol{\rho}_A$与$\boldsymbol{\rho}_B$在 0 之外没有简并的本征值，$|\psi\rangle_{AB}$的 Schmidt 分解就唯一地确定了. 我们可以把$\boldsymbol{\rho}_A$与$\boldsymbol{\rho}_B$对角化找出$|i\rangle_A$和$|i'\rangle_B$，把它们配起对来求和再乘以p_i，求和就得$|\psi\rangle_{AB}$(精确到共同相位).

暂时回到 EPR 佯谬. EPR 反对意见之一就是对 B 的s_z测量得到$|\uparrow_z\rangle_B$造成的状态塌缩瞬间给 A 传递了信息，使得对 A 的即刻测量唯一地得到$|\downarrow_z\rangle_A$. EPR 将它诠释为超距的相互作用. 考虑总自旋为 1 的态

$$|\psi\rangle_{AB}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle_A\,|\uparrow_z\rangle_B+|\downarrow_z\rangle_A\,|\downarrow_z\rangle_B). \tag{2.2.27}$$

对 B 的测量导致在系综中对 A 自旋的制备

$$\boldsymbol{\rho}_A=\frac{1}{2}\,|\uparrow_z\rangle_{AA}\langle\uparrow_z|+\frac{1}{2}\,|\downarrow_z\rangle_{AA}\langle\downarrow_z|, \tag{2.2.28}$$

它有非零的简并本征态，因此式(2.2.27)的 Schmidt 分解不是唯一的. 另一个分解

$$|\psi\rangle_{AB}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_x\rangle_A\,|\uparrow_x\rangle_B+|\downarrow_x\rangle_A\,|\downarrow_x\rangle_B), \tag{2.2.29}$$

与式(2.2.29)不同之处在于H_A与H_B基的选择不同. 式(2.2.27)与式(2.2.29)描述相同的状态，即自旋为 1 的二组分缠绕态，区别在于自旋量子化轴不同. 在对$|\cdot\rangle_A$与$|\cdot\rangle_B$同时进行幺正变换时彼此转化. 对 B 进行s_x的测量在系综中制备自旋态$\{|\uparrow_x\rangle_A|\uparrow_x\rangle_B\}$. 对 A 进行$s_x$测量导致同样的密度矩阵式(2.2.28). 因此对 A 过行s_z测量并不能显现对 B 的测量所发出的信息，即对 B 测量的量子化轴可以在任何方向. 这个性质将结合量子密钥分布有关问题进一步讨论.

Schmidt 数用来表征两组分纯态的缠绕. 在$\mathcal{H}_A$与$\mathcal{H}_B$中纯态的直积是可分离的二组分纯态

$$|\psi\rangle_{AB}=|\varphi\rangle_A\otimes|\chi\rangle_B. \tag{2.2.30}$$

对这个态 Schmidt 数是 1. 对任何 Schmidt 数大于 1 的态，不能表示为这种形式，它是缠绕的.

最后提一下，两个可分辨粒子体系的缠绕是可以确切定义的，它的性质也充分研讨过. 对两个不可分辨粒子，它的性质是非平庸的. J. Schliemann 等[14]讨论了二费密子体系的缠绕，发现可以把可分辨二粒子体系的结果移植过来. 对二玻色子体系的研究有不同方法的结果报告[15,16].

2.2.3 EPR-Bell 态的进一步讨论

在第 1 章(1.3 节)中讨论过 EPR-Bell 态，用 q 比特语言表示，

$$|\phi^{\pm}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle\pm|11\rangle),$$

$$|\psi^{\pm}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle\pm|10\rangle).\tag{2.2.31}$$

它们是"最大限度的缠绕态"，意思是对q比特B取迹导致

$$\boldsymbol{\rho}_{\mathrm{A}}=\mathrm{tr}_{\mathrm{B}}(|\phi^{+}\rangle_{\mathrm{AB\,AB}}\langle\phi^{+}|)=\frac{1}{2}\boldsymbol{I}_{\mathrm{A}}.\tag{2.2.32}$$

类似地，对A取迹导致$\boldsymbol{\rho}_{\mathrm{B}}=\frac{1}{2}\boldsymbol{I}_{\mathrm{B}}$. 即如对自旋A在任何轴方向进行测量，导致自旋B的结果完全随机，向上和向下为1/2的等几率. 在这样的缠绕态中两个q比特的信息不能通过A或对B的定域测量获得.

缠绕态(2.2.31)是两个相互对易的算符$\boldsymbol{\sigma}_1^{(A)}\ \boldsymbol{\sigma}_1^{(B)}$和$\boldsymbol{\sigma}_3^{(A)}\ \boldsymbol{\sigma}_3^{(B)}$的同时本征态. $\boldsymbol{\sigma}_3^{(A)}\ \boldsymbol{\sigma}_3^{(B)}$的本征态被称为"宇称比特"(自旋平行或者反平行)，$\boldsymbol{\sigma}_1^{(A)}\ \boldsymbol{\sigma}_1^{(B)}$的本征态被称为"相比特"(在叠加时取+或一号). 每个状态携带两比特信息，由表2.1给出.

表2.1　EPR-Bell态的宇称比特和相比特

状态	宇称比特	相比特
ϕ^+	+	+
ϕ^-	+	−
ψ^+	−	+
ψ^-	−	−

信息的发信人和收信人相距很远. 他们各自分享一个缠绕比特的一个组分，每个人分别对在A处或在B处的信息通过幺正变换进行操作. 例如Alice对在A处的q比特作用以$\boldsymbol{\sigma}_3$，将$|0\rangle_{\mathrm{A}}$和$|1\rangle_{\mathrm{A}}$的相对相位翻转，得到以下变化：

$$\begin{aligned}&|\phi^{+}\rangle\leftrightarrow|\phi^{-}\rangle,\\&|\psi^{+}\rangle\leftrightarrow|\psi^{-}\rangle.\end{aligned}\tag{2.2.33}$$

他也可以对q比特作用以σ_1，将自旋翻转$|0\rangle_{\mathrm{A}}\leftrightarrow|1\rangle_{\mathrm{A}}$，得到以下变化：

$$\begin{aligned}&|\phi^{+}\rangle\leftrightarrow|\psi^{+}\rangle,\\&|\phi^{-}\rangle\leftrightarrow|\psi^{-}\rangle.\end{aligned}\tag{2.2.34}$$

这类定域幺正变换将一个缠绕态变为另外一个. Bob也可以对B处的q比特作类似的变换. 在变换过程中$\boldsymbol{\rho}_{\mathrm{A}}=\boldsymbol{\rho}_{\mathrm{B}}=\frac{1}{2}I$不变化，即存储于任一个EPR-Bell态的信息不可能由局域操作来获得，即使Alice和Bob可以对他们的测量结果进行经典信息的交换，了解他们测量结果的关联. 设他们都测量了$\boldsymbol{\sigma}_3$. 因为$\boldsymbol{\sigma}_3^{(A)}$和$\boldsymbol{\sigma}_3^{(B)}$都和算符$\boldsymbol{\sigma}_3^{(A)}\ \boldsymbol{\sigma}_3^{(B)}$对易，测量不干扰宇称比特，将测量结果合在一起就知道了宇称比特. 另外的选择是测$\boldsymbol{\sigma}_1^{(A)}$和$\boldsymbol{\sigma}_1^{(B)}$，他们获得了相比特的信息，代价是干扰了宇称比特. 如果不去分别获得$\boldsymbol{\sigma}_3^{(A)}$和$\boldsymbol{\sigma}_3^{(B)}$的信息，只需测量乘积$\boldsymbol{\sigma}_3^{(A)}\ \boldsymbol{\sigma}_3^{(B)}$，就可以不干扰$\boldsymbol{\sigma}_1^{(A)}\ \boldsymbol{\sigma}_1^{(B)}$. 这不能由定域的操作得到，而必须通过二人联合的努力. 定义单q比特变换Hadamard变换

$$\boldsymbol{H}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_3),\tag{2.2.35}$$

它具有以下性质：

$$\boldsymbol{H}^2=\boldsymbol{I},$$

$$H\sigma_1 H = \sigma_3,$$
$$H\sigma_3 H = \sigma_1. \tag{2.2.36}$$

在 Bloch 球语言中，它代表绕轴$\hat{\boldsymbol{n}}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\boldsymbol{n}}_1+\hat{\boldsymbol{n}}_3)$转 $\theta=\pi$ 角. 它将$\hat{z}$转到$\hat{x}$，$\hat{x}$转到$\hat{z}$：

$$R(\hat{\boldsymbol{n}},\theta) = \cos\frac{\theta}{2} + \mathrm{i}\,\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sin\frac{\theta}{2} \xrightarrow{\theta=\pi} \mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_3) = \mathrm{i}\boldsymbol{H}. \tag{2.2.37}$$

我们还需要在 2.1.1 节中引入的 2-q 比特操作 **CNOT**：

$$\text{CNOT}: |a,b\rangle \to |a,a\oplus b\rangle, \tag{2.2.38}$$
$$(\text{CNOT})^2 = 1. \tag{2.2.39}$$

在量子电路图解中(图 2.1)它是

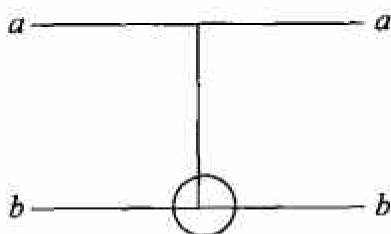


图 2.1 CNOT 图解

把这两种操作组合起来，就有以下图解(图 2.2)：

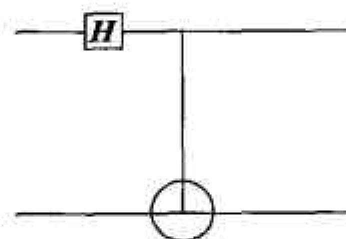


图 2.2 $\boldsymbol{H}$ 与 CNOT 组合图解

意思是将 H 用于 q 比特 a，再将 CNOT 用于其结果. 作用于 Bool 态，联合变换导致 EPR-Bell 态①.

$$|00\rangle \xrightarrow{\boldsymbol{H}} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)|0\rangle \xrightarrow{\text{CNOT}} |\phi^+\rangle$$
$$|01\rangle \xrightarrow{\boldsymbol{H}} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)|1\rangle \xrightarrow{\text{CNOT}} |\psi^+\rangle$$
$$|10\rangle \xrightarrow{\boldsymbol{H}} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle-|1\rangle)|0\rangle \xrightarrow{\text{CNOT}} |\phi^-\rangle$$
$$|11\rangle \xrightarrow{\boldsymbol{H}} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle-|1\rangle)|0\rangle \xrightarrow{\text{CNOT}} |\psi^-\rangle \tag{2.2.40}$$

以上操作的逆将 EPR-Bell 变变回 Bool 基各态. 注意 CNOT 态是非定域操作，它对靶比特的作用取决于控制比特. 现在可以对 Bool 态进行测量，结果显示出原始两个 EPR-Bell 态的两个 q 比特.

2.3 缠绕对量子信息学的应用

在 2.1.3 节中给出过一些例子，利用缠绕态完成经典计算很困难、甚至不可能完成任务. 在这里我们详细讨论缠绕这个量子力学的基础概念对量子信息的一些应用.

① 直接计算可以得到$\boldsymbol{H}|0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)$,

$\boldsymbol{H}|1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle-|1\rangle)$.

2.3.1 致密编码

我们用以下的例子说明，传送量子比特比传送经典比特更为有利. Alice 可以制备$|\uparrow_z\rangle$和$|\downarrow_z\rangle$，Bob 可以通过测量判断她的选择. 但实际上 Alice 可以利用缠绕态进行更有效的信息传递. 她自己保留一个 q 比特，把缠绕态的另一个 q 比特传给 Bob. 他们保留着各自分享的缠绕对就可以传递简短的信息. Alice 可以在她的 q 比特上进行下列变换之一.

1. 全同变换：1.

2. 绕$\hat{x}$旋转 π：$e^{i\sigma_1\pi/2}=i\sigma_1$.

3. 绕$\hat{y}$旋转 π：$e^{i\sigma_2\pi/2}=i\sigma_2$.

4. 绕$\hat{z}$旋转 π：$e^{i\sigma_3\pi/2}=i\sigma_3$.

这些变换作用于$|\phi^+\rangle_{AB}$分别导致$|\phi^+\rangle_{AB}$，$|\psi^+\rangle_{AB}$，$|\psi^-\rangle_{AB}$，$|\phi^-\rangle_{AB}$各态. 每个态携带两个 q 比特信息（宇称比特和相比特）. Alice 可以根据所需结果态的宇称比特和相比特（这就是她要传给 Bob 的信息）选择她的操作. 她对自己的 q 比特进行操作并将操作后的 q 比特传给 Bob. 接收到 q 比特后，Bob 就对现在他所有的一对 q 比特执行正交测量 $\sigma_1^{(A)}\sigma_1^{(B)}$ 和 $\sigma_3^{(A)}\sigma_3^{(B)}$，确定这一对的宇称比特和相比特. 在此行动中，Alice 送出一个 q 比特，而 Bob 获得了两个 q 比特信息. 这是经典信息学做不到的. 通信的效率取决于应用事先存储的缠绕态. 致密编码由 Innsbruck 研究组[17]实现.

2.3.2 量子密码学、EPR 量子钥分布

Alice 和 Bob 的通信是高度保密的. 为了避免被窃听，他们要用只有他们二人才知道的密钥，这样他们就能对信息编码和解码. 但如何才能使密钥绝对安全呢？最好的办法是在通信时才建立密钥，而且只使用一次. 这种密码首先由 C. H. Bennett 和 G. Brassard[18]用光子极化实现，未涉及缠绕. 此后的协议都是利用量子缠绕的. 设 Alice 和 Bob 分享一系列缠绕对，每一对都制备为$|\psi^-\rangle$态. 他们达成一个协议以建立密钥. 对共同享有的每一对 q 比特每个人自己决定测 σ_1 或 σ_3. 对每一对 q 比特，这个选择是随意的. 每次测量后他们公开宣布自己的选择，但不公开测量的结果. 如他们选择测量的可观测量不同，这对 q 比特就弃置不用，因为结果是不相关联的. 当他们所选的可观测量相同时，他们的结果是反关联的，但也是随机的. 这就建立了密钥，任何窃听者是不了解的. 即使窃听者能够接触到二人共享的某些 q 比特对时，协议也是安全的. 窃听者接触到一个 q 比特对时，这对便不再处于$|\psi^-\rangle$态，而是和窃听者的 q 比特缠绕起来了. 在 Alice 和 Bob 宣布所测的可观测量时，窃听者便可以测量自己的 q 比特，以图获得 Alice 和 Bob 测量的结果. 他能够如愿以偿吗？最普遍的 AB 对和窃听者的 q 比特(E)的状态是：

$$
\begin{aligned}
|\gamma\rangle_{ABE} = &|00\rangle_{AB}|e_{00}\rangle_E+|01\rangle_{AB}|e_{01}\rangle_E \\
&+|10\rangle_{AB}|e_{10}\rangle_E+|11\rangle_{AB}|e_{11}\rangle_E.
\end{aligned} \tag{2.3.1}
$$

因为$|\psi^-\rangle$是 $\sigma_1^{(A)}\sigma_1^{(B)}$ 和 $\sigma_3^{(A)}\sigma_3^{(B)}$ 的本征态，Alice 和 Bob 可以验证他们所共享的这些对是否仍保持这个性质. 他们牺牲一部分共享的对所掌握的密钥来进行安全检查. 如果测量的结果是肯定的，即 q 比特具有负的宇称比特和相比特，式(2.3.1)必须满足的要求是：

(1) 为了 $\sigma_1^{(A)}\sigma_1^{(B)}=-1$，它必须是

$$
|\gamma\rangle_{ABE}=|01\rangle_{AB}|e_{01}\rangle_E+|10\rangle_{AB}|e_{10}\rangle_E. \tag{2.3.2}
$$

(2) 为了 $\sigma_3^{(A)}\sigma_3^{(B)}=-1$,它必须是

$$|\gamma\rangle_{ABE}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle-|10\rangle)|e\rangle_E, \tag{2.3.3}$$

此处

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|e\rangle_E\equiv|e_{10}\rangle_E=-|e_{01}\rangle_E. \tag{2.3.4}$$

$\sigma_3^{(A)}\sigma_3^{(B)}=-1$ 要求导致式(2.3.3),即 AB 对和 E 没有缠绕,窃听者就不可能通过测量自己的 q 比特了解到 Alice 和 Bob 的测量结果.检查获得肯定结果使 Alice 和 Bob 可以确信密钥是安全的.如果窃听者得以把他的 q 比特和 Alice/Bob 的 q 比特对缠绕起来,检查的结果就是否定的,即 $\sigma_3^{(A)}\sigma_3^{(B)}\neq-1$,Alice 和 Bob 就发现了窃听活动,他们就可以放弃密钥而建立新的.以上的协议是主题[19],也有主题的变奏①.协议[19]由 Innsbruck 研究组实现[20].在这个实现中 Alice 和 Bob 采用协议[18]建立 49984 比特密钥.Alice 通过 XOR 操作用密钥对图像加密,并通过计算机网络传给 Bob.Bob 用密钥对图像解密.解密后的图像仅有极少数错误(来自密钥中的比特错误).结果示于图 2.3.

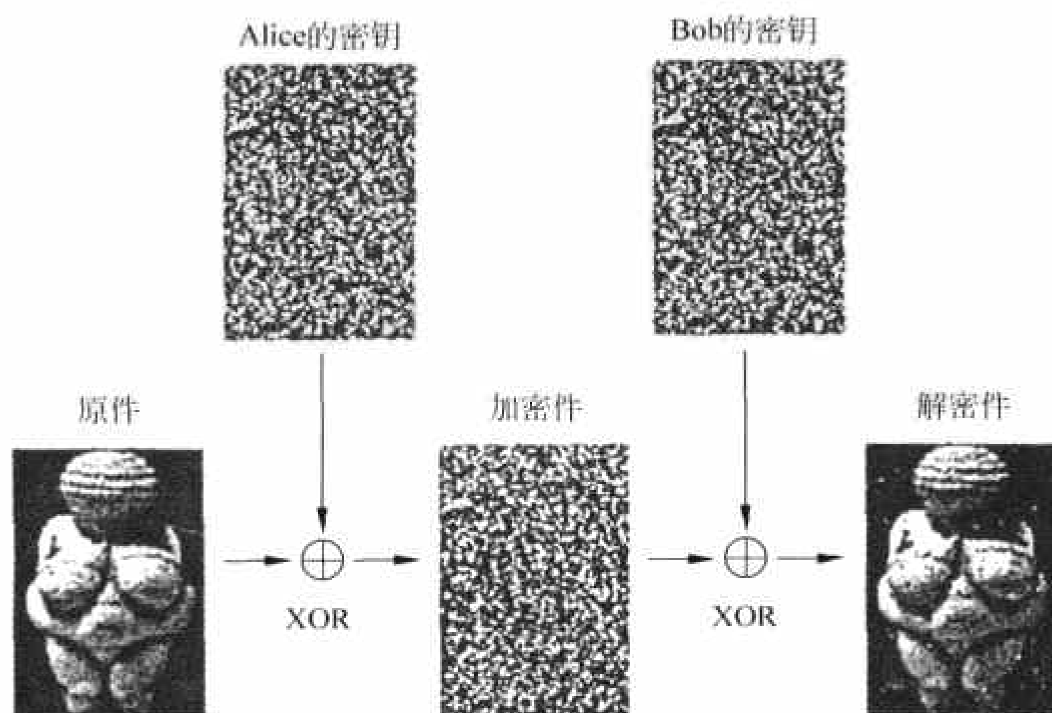


图 2.3 Willendorf 的维纳斯肖像(存于维也纳自然历史博物馆)的安全传送.取自[20]

2.3.3 量子非克隆定理

一个聪明的窃听者本来可以不加干扰地复制 Alice 和 Bob 密钥的 q 比特,通过对复制品的测量获得他们的密钥.但量子密钥是受保护的,因为要想在不干扰的条件下获得区别非正交量子态的信息是不可能的.令 $|\psi\rangle$ 和 $|\varphi\rangle$ 代表在 AB 的 Hilbert 空间中的两个非正交态,$\langle\psi|\varphi\rangle\neq0$.窃听者想要通过执行幺正变换将它们复制

$$\left.\begin{aligned}|\psi\rangle\otimes|0\rangle_E&\rightarrow|\psi\rangle\otimes|i\rangle_E,\\|\varphi\rangle\otimes|0\rangle_E&\rightarrow|\varphi\rangle\otimes|j\rangle_E.\end{aligned}\right\} \tag{2.3.5}$$

幺正性意味着

① 见[5]的 4.2 节.

$$
\begin{aligned}
\langle \psi \mid \varphi \rangle &= ({}_{\mathrm{E}}\langle 0 \mid \otimes \langle \psi \mid)(\mid \varphi \rangle \otimes \mid 0 \rangle_{\mathrm{E}}) \\
&= ({}_{\mathrm{E}}\langle i \mid \otimes \langle \psi \mid)(\mid \varphi \rangle \otimes \mid j \rangle_{\mathrm{E}}) \\
&= \langle \psi \mid \varphi \rangle_{\mathrm{E}} \langle i \mid j \rangle_{\mathrm{E}}.
\end{aligned} \tag{2.3.6}
$$

对$\langle\psi|\varphi\rangle\neq 0$，有${}_{\mathrm{E}}\langle i|j\rangle_{\mathrm{E}}=1$，即$|i\rangle=|j\rangle$. 窃听者对于$|\psi\rangle$和$|\varphi\rangle$得到同样的复制件，因此他不能区别非正交态. 如果$|\psi\rangle$和$|\varphi\rangle$正交，情况就不同了. 正交态$|0\rangle$和$|1\rangle$在原则上和经典比特一样不能免于在不被干扰的情况下被复制. 幺正变换的作用如下：

$$
\begin{aligned}
U: \mid 0\rangle_{\mathrm{A}} \mid 0\rangle_{\mathrm{E}} &\to \mid 0\rangle_{\mathrm{A}} \mid 0\rangle_{\mathrm{E}}, \\
\mid 1\rangle_{\mathrm{A}} \mid 0\rangle_{\mathrm{E}} &\to \mid 1\rangle_{\mathrm{A}} \mid 1\rangle_{\mathrm{E}},
\end{aligned} \tag{2.3.7}
$$

它将在 A 的状态复制到 E 处. 但如果在 A 处的是一个一般的 q 比特

$$
\mid \varphi\rangle_{\mathrm{A}} = a \mid 0\rangle_{\mathrm{A}} + b \mid 1\rangle_{\mathrm{A}}, \tag{2.3.8}
$$

就有

$$
\begin{aligned}
U: (a \mid 0\rangle_{\mathrm{A}} + b \mid 1\rangle_{\mathrm{A}}) \mid 0\rangle_{\mathrm{E}} \\
\to a \mid 0\rangle_{\mathrm{A}} \mid 0\rangle_{\mathrm{E}} + b \mid 1\rangle_{\mathrm{A}} \mid 1\rangle_{\mathrm{E}},
\end{aligned} \tag{2.3.9}
$$

它和原件与复制件的直积$|\psi\rangle_{\mathrm{A}}|\psi\rangle_{\mathrm{E}}$不同. 因此一个一般的 q 比特，它和$|0\rangle$或$|1\rangle$不正交，就不能被复制. 我们还可以将条件再放松一些. 在原有的 Hilbert 空间$\mathcal{H}_{\mathrm{A}}$(原件)$\otimes\mathcal{H}_{\mathrm{E}}$(复制件)基础上再包括一个辅助的$\mathcal{H}_{\mathrm{F}}$，并定义最普遍的复制幺正变换：

$$
\begin{aligned}
U: \mid \psi\rangle_{\mathrm{A}} \mid 0\rangle_{\mathrm{E}} \mid 0\rangle_{\mathrm{F}} &\to \mid \psi\rangle_{\mathrm{A}} \mid \psi\rangle_{\mathrm{E}} \mid i\rangle_{\mathrm{F}}, \\
\mid \varphi\rangle_{\mathrm{A}} \mid 0\rangle_{\mathrm{E}} \mid 0\rangle_{\mathrm{F}} &\to \mid \varphi\rangle_{\mathrm{A}} \mid \varphi\rangle_{\mathrm{E}} \mid j\rangle_{\mathrm{F}},
\end{aligned} \tag{2.3.10}
$$

此处$|\psi\rangle$和$|\varphi\rangle$是不同的两个非正交态. 幺正变换给出：

$$
{}_{\mathrm{A}}\langle \psi \mid \varphi\rangle_{\mathrm{A}} = {}_{\mathrm{A}}\langle \psi \mid \varphi\rangle_{\mathrm{A}\,\mathrm{E}}\langle \psi \mid \varphi\rangle_{\mathrm{E}\,\mathrm{F}}\langle i \mid j\rangle_{\mathrm{F}},
$$

即

$$
1 = {}_{\mathrm{E}}\langle \psi \mid \varphi\rangle_{\mathrm{E}\,\mathrm{E}}\langle i \mid j\rangle_{\mathrm{F}}.
$$

对归一化的态有

$$
\langle \psi \mid \varphi \rangle = 1, \tag{2.3.11}
$$

意思是$|\psi\rangle$和$|\varphi\rangle$代表同一个射线态(只相差一个相因子的波函数). 没有任何一个幺正变换能同时复制两个有区别的、非正交的态. 这就是量子非克隆定理.

2.3.4　量子远程传态

考虑一个奇特的处境. Alice 有一个 q 比特，但她却不知道它的状态. Bob 却需要这样一个状态为他所用. 二人之间有经典通道，此外他们还共享一个处于$|\phi^{+}\rangle_{\mathrm{AB}}$态的缠绕对. 这个缠绕对可以根据以下协议帮助他们完成愿望. Alice 对她的未知状态(记为$|\chi\rangle_{\mathrm{C}}$)以及她分享的缠绕态的一个 q 比特进行 2.2.3 节描述的 Bell 测量，从而把它们投影到 4 个 EPR-Bell 态$|\phi^{\pm}\rangle_{\mathrm{CA}}$，$|\psi^{\pm}\rangle_{\mathrm{CA}}$其中之一. 她将测量结果(一个宇称比特、一个相比特)通过经典通道传递给 Bob. 收到信息后，Bob 对自己分享的 q 比特$|\cdot\rangle_{\mathrm{B}}$进行幺正变换，变换与收到的 EPR-Bell 态的关系根据以下协议(表 2.2)规定：

表 2.2 量子远程传态协议

幺正变换	EPR 态	幺正变换	EPR 态
1_B	$\|\phi^+\rangle_{CA}$	$\sigma_2^{(B)}$	$\|\psi^-\rangle_{CA}$
$\sigma_1^{(B)}$	$\|\psi^+\rangle_{CA}$	$\sigma_3^{(B)}$	$\|\phi^-\rangle_{CA}$

这样做了之后，Bob 所掌握的正是$|\chi\rangle_B$态，证明如下. 令 Alice 的未知 q 比特为$|\chi\rangle_C=a|0\rangle_C+b|1\rangle_C$，直接计算得出

$$
\begin{aligned}
|\chi\rangle_C|\phi^+\rangle_{AB} &= (a|0\rangle_C+b|1\rangle_C)\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle_{AB}+|11\rangle_{AB}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(a|000\rangle_{CAB}+a|011\rangle_{CAB})(b|100\rangle_{CAB}+b|111\rangle_{CAB}) \\
&= \frac{1}{2}a(|\phi^+\rangle_{CA}+|\phi^-\rangle_{CA})|0\rangle_B+\frac{1}{2}a(|\psi^+\rangle_{CA}+|\psi^-\rangle_{CA})|1\rangle_B \\
&\quad +\frac{1}{2}b(|\psi^+\rangle_{CA}-|\psi^-\rangle_{CA})|0\rangle_B+\frac{1}{2}b(|\phi^+\rangle_{CA}-|\phi^-\rangle_{CA})|1\rangle_B \\
&= \frac{1}{2}|\phi^+\rangle_{CA}(a|0\rangle_B+b|1\rangle_B)+\frac{1}{2}|\psi^+\rangle_{CA}(a|1\rangle_B+b|0\rangle_B) \\
&\quad +\frac{1}{2}|\psi^-\rangle_{CA}(a|1\rangle_B-b|0\rangle_B)+\frac{1}{2}|\phi^-\rangle_{CA}(a|0\rangle_B-b|1\rangle_B) \\
&= \frac{1}{2}|\phi^+\rangle_{CA}|\chi\rangle_B+\frac{1}{2}|\psi^+\rangle_{CA}\sigma_1|\chi\rangle_B \\
&\quad +\frac{1}{2}|\psi^-\rangle_{CA}(-i\sigma_2)|\chi\rangle_B+\frac{1}{2}|\phi^-\rangle_{CA}\sigma_3|\chi\rangle_B.
\end{aligned}
\tag{2.3.12}
$$

结果表明，对 Alice 的 q 比特$|\chi\rangle_C$和共享的缠绕对中 Alice 的 q 比特$|\cdot\rangle_A$进行 Bell 测量，结果是 4 种等几率出现的选择，而每一个都按表 2.2 和 Bob 的 q 比特$|\chi\rangle_B$相联系. 正是测量过程，一方面将 CA 对投影到 Bell 态之一，同时改变了 Bob 的 q 比特. 表 2.2 中规定的对应正是为了从 B 处的 q 比特经过适当的幺正变换恢复状态$|\chi\rangle$. 从效果上看，$|\chi\rangle$状态是从 A 远程传递到 B. 看起来有些令人困惑，一个经典通道如何能传递关于 q 比特的信息. 实际上起量子通道作用的是二人分享的缠绕对. 重要的是，远程传态是和非克隆定理完全相洽的. q 比特$|\chi\rangle_C$是在复制品$|\chi\rangle_B$产生前就被测量过程消灭了. 这个妙法被称为量子远程传态[21].

利用光子极化的量子远程传态是由 Innsbruck 研究组[22]实现的，成功率是 25%，此后由史砚华研究组[23]实现，成功率为 100%. 连续变量的远程传态是由 L. Vaidman[24]建议的，在实验上由加州理工研究组[25]实现的. A. Zeilinger 研究组[26]实现了跨过维也纳多瑙河 600m 远的光子高保真度远程传递. 量子通道（光纤安装在河床下面的隧道中）暴露在温度涨落和其他环境因素干扰下，实验难度是很大的. 一个微妙的问题是：Bob 要根据 Alice 的 Bell 测量结果准备幺正变换，换句话说他应该在分享的 q 比特到达之前准备好仪器. 在这个实例中，Alice 的测量结果通过经典的微波通道传递到 Bob，比分享的 q 比特早到 1.5μs，后者是通过光纤传来，速度是$\frac{2}{3}c$（c 为光速）. Bob 可以在这个时间间隔内激活他的电-光调制器.

2.4 结束语

量子力学对量子信息学和量子计算的应用已经创建了一个新的方向，理论和实验成果大量涌现. 作为反馈，这个新领域的问题也已经推进了量子力学基础概念、特别是缠绕态的研究. 在上面的讨论中只涉及二组分纯缠绕态. 下面简单列举一下在实现量子计算机的努力过程中得到推动的新进展.

在这个方向的主要问题之一是，各种干扰会导致叠加态的退相干、缠绕态的退化、在传输过程中和在 q 比特操作中发生错误等；而量子计算机在抗干扰方面往往是脆弱的. 经典计算机也会发生错误，治理方法是采用纠错编码：将信息做好备份，当作控制. 但由于量子非克隆定理，在量子计算中不能采用同样方法. 量子纠错编码[27]需要冗余信息，以备数据通过噪声通道时会有损失. 编码将输入信息编为 5 个 q 比特的缠绕态①，当任何 q 比特遭遇破坏时，解码器就将第一个 q 比特恢复为原样，而将错误的效应分散在其他 4 个 q 比特，接着把它们抛弃. "容忍错误的量子计算"(quantum fault tolerating computation，见[28]评述)将量子纠错编码用于逻辑状态 $|\psi_L\rangle$，存储或进行运算，处理信息通过一束平行通道，周期性设置有恢复门阵列. 在每个阵列中备有清洁的辅助 q 比特，纠正错误后误差的效应分散在一些辅助 q 比特中，此后将他们抛弃. 在恢复阵列中也会出现错误，它们可以在下一个恢复阵列中得到改正. 多粒子缠绕态在纠错中起重要作用. 在 1.10.4 节中三光子缠绕态[29]被用来检验"定域实在性理论"，它们是 8 种最大缠绕Greenberger-Horne-Zeilinger态的例子[30]. 同一个实验组获得了四光子缠绕态[31]. 五光子缠绕态由潘建伟的中国科技大学实验组实现[32]. 五个或更多的缠绕粒子的操控对于普适纠错和开放地址远程传态是需要的. 四个俘获离子的缠绕态由 NIST(美国国家标准和工艺研究院)研究组[33]实现. 在处理和传输过程中的退相干导致混合态缠绕[34]. 为了恢复最大缠绕，需要一个纯化(蒸馏)过程[35]. 实验过程由 Innsbruck 研究组[36]实现. 多粒子缠绕和混合态缠绕的理论是十分丰富和具有挑战性的，有很多未解决的问题等待进一步研究.

为了保持相干性，可以采用一个体系，将每一个 q 比特和一个辅助 q 比特配对，并将他们编码为保持相干状态[37]，或者在无退相干子空间工作[38]，它已在实验上实现[39].

物理学各分支的实验研究往往被理论上的巨大进展所激励. 在 1995 年 C. H. Bennett 和 D. P. DiVincenzo 发表了一篇文章，题为"量子计算——走向工程时代"[40]. 在当时怀疑派还在打赌，在一个 500 位的数被因子化以前连太阳都要烧完了. 从那时开始，有利于量子计算机的根据增加了，但要走向实现它，还有很长的路要走. D. P. DiVincenzo 和 D. Loss[41]给出了一张表，列出在达到最后目标以前需要解决的一些问题. 对近期的实验结果，读者可以参考专著[42].

参考文献

[1] Benioff P. J Stat Phys，1980，22：563；1882，29：515；Phys Rev Lett，1982，48：1581.
[2] Feynman R. Int J Theor Phys，1982，21：467；Optics News，1985，11：11.

---

① 令 $\psi=a|0\rangle+b|1\rangle$. 克隆 $\psi\to\psi\otimes\psi\otimes\psi$ 是量子力学不允许的，但 $\psi=a|0\rangle+b|1\rangle\to a|000\rangle+b|111\rangle\neq\psi\otimes\psi\otimes\psi$ 是允许的. 这是经典计算的"三重重复"的推广. 量子纠错需要 5 个 q 比特，因为 Bool 态的叠加需要保护.

[3] Landauer R. Phys Today,1991,44(5): 23; Bennett C H,DiVincenzo D P. Nature,2000,404: 247.
[4] Feynman R. Feynman Lectures on Computation. Hey A J G,Allen R W,eds. Reading,Massachusetts; Addison-Wesley,1996; Nielsen M A,Chuang I L. Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge: Cambridge University Press,2000.
[5] Preskill J. Lecture Notes on Quantum Information and Computation, 1998. http: //www. theory. caltech. edu/~preskill/ph229.
[6] Deutsch W. London,Proc Roy Soc. 1985,A400: 97.
[7] Chuang I L,et al. Nature,1998,393: 143.
[8] Shor P W. In: Proceedings of the 35th Annual Symposium on the Foundations of Computer Science. Los Alamitos,California. IEEE Computer Society Press,1994,124-133.
[9] Grover L K. Phys Rev Lett,1997,79: 325.
[10] Chuang I L,Gershenfeld N,Kubinec M. Phys Rev Lett,1998,80: 3408.
[11] Seife C. Science,2001,293: 2026.
[12] Wiesner S. Los Alamos Preprint quant-ph/9603028,1996.
[13] Mattle K,Weinfurter H,Kwiat P G,Zeilinger A. Phys Rev Lett,1996,76: 4656.
[14] Schliemann J,Loss D,MacDonald A H. Phys Rev,2001,B 63: 085311. Schliemann J,Cirac J I,Kus M,Lewenstein M,Loss D,quant-ph/0012094.
[15] Li Y S,Zeng B,Liu X S,Long G L. Phys Rev 2001,A 64: 016112.
[16] Paskauskas R,You L. quant-ph/0106117.
[17] Abrams D S,Lloyd S. Phys Rev Lett,1997,79: 2586. Bouwmeester D,Pan J-W,Mattle K,Eibl M, Weinfurter H. Nature,1997,390: 575.
[18] Bennett C H,Brassard G. In: Proc. International Conf. on Computer Systems and Signal Processing, Bangalore,1984
[19] Ekert A K. Phys Rev Lett,1991,67: 661; Bennett C H,Brassard G,Mermin N D. Phys Rev Lett, 1992,68: 557.
[20] Jennewein T,Simon C,Weihs G,Weinfurter H,Zeililnger A. Phys Rev Lett,2000,84: 4729.
[21] Bennett C H, Brassard G, Crepean C, Josza R, Peres A, Wooters W K. Phys Rev Lett, 1993, 70: 1895.
[22] Bouwmeester D,Pan J-W,Mattle K,Eibl M,Weinfurter H. Nature,1997,390: 575.
[23] Kim Y H,Kulik S P,Shih Y. Phys Rev Lett,2001,86: 1370.
[24] Vaidman L. Phys Rev,1994,A 49: 1473.
[25] Furusawa A, Srenson J L, Braunstein S L, Fuchs C A, Kimble H J, Polzik E S. Science, 1998, 282: 706.
[26] Ursin R,et al. Nature,2004,430: 849.
[27] Shor P. Phys Rev; 1995,A 52: 2493.
[28] Preskill J. Proc Roy Soc London,1998,A 454: 385.
[29] Bouwmeester D,Pan J W,Daniell M,Weinfurter H,Zeilinger A. Phys Rev Lett,1999,82: 1375.
[30] Greenberger D M,Horne M,Zeilinger A. In: Bell's Theorem,Quantum Theory and Conceptions of the Universe. Kafatos M,ed. Dordrecht: Kluwer,1989.
[31] Pan J W,Daniell M,Gasparoni G,Weihs G,Zeilinger A. Phys Rev Lett,2001,86: 4435.
[32] Zhao Z,et al. Nature,2004,430: 54.
[33] Sackett C A,et al. Nature,2000,404: 256.
[34] Bennett C H,DiVincenzo D P,Smolin J,Wooters W K. Phys Rev 1996,A 54: 3824.
[35] Bennett C H,et al. Phys Rev Lett,1996,76: 722; Deutsch D,et al. Phys Rev Lett,1996,77: 2818.
[36] Pan J W,Simon C,Bruckner C,Zeilinger A. Nature,2001,410: 1067.

[37] Duan L-M, Guo G-C. Phys Rev Lett, 1997, 79: 1953.
[38] Lidar D A, Chuang I L, Whaley K B. Phys Rev Lett, 1998, 81: 2594.
[39] Kwiat P G, Berlund A J, Altepeter J B, White A G. Science, 2000, 290: 498.
[40] Bennett C H, DiVincenzo D P. Nature, 1995, 377: 389.
[41] Bennett C H, DiVincenzo D P. Superlatt Microstruct, 1998, 23: 419.
[42] Bouwmeester D, Ekert A, Zeilinger A. The Physics of Quantum Information. Berlin: Springer, 2000.

第3章
量子力学中的几何相

考虑一个无限长的磁通管，全部磁通都局限在管内，因此外面的场强 $\boldsymbol{B}$ 为 0. 电子在管外运动，它们会感到磁通管的存在吗？对这个问题的第一个反应可能是"不会". 如仔细想一下，进入 Schrödinger 方程的是势 $(A_0, \boldsymbol{A})$ 而不是场强 $(\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B})$，可能会改变想法. 虽然在通量管外 $\boldsymbol{B}=0$，但矢量势 $\boldsymbol{A}$ 却不为 0. 对这个问题的研究导致著名的 Aharonov-Bohm 效应. 结果是，局域电子态感不到磁通管的存在，因为局域的场强为 0，而在通量管附近波函数为有限的电子延展态能感受它的整体效应. 这个结论在当时引起不少物理学家的惊讶. 这个研究也导致著名的结论，即带电粒子的经典电动力学中，物理是由场强决定，但对服从量子力学 Schrödinger 方程的粒子在电磁场中的运动是由杨振宁和吴大峻引入的不可积相因子决定的，而场强是不足以决定物理，它们是欠定的，电磁势是超定的. 关于这个问题将在 3.1～3.3 节中介绍.

Aharonov-Bohm 效应可以用微分几何中的概念如平行输运、连络等诠释. 将在 3.4 节中介绍这些概念，使读者有准备去接受另一个惊讶——Berry 相. 量子力学中波函数的相位是个微妙的概念. 考虑与时间有关的 Schrödinger 方程的解. 方程中的势按事先确定好的时间的周期函数演化. 当势经过一个周期回到初始的形式时，出现了非平庸的问题. 波函数是否回到它初始的形式呢？答案是否定的. 出现了与时间有关的相位. 能否将波函数重新定义从而将相因子吸收在其中呢？为了回答这个问题需要进行仔细的研究. 由此产生的 Berry 相以及相关问题在 3.5～3.7 节中介绍. Berry 相不仅在量子力学中，而且在物理学许多分支中都有深远的影响.

3.1 Aharonov-Bohm 效应

带电粒子(如电子)在给定电磁场中的运动问题在量子力学早期发展中就得到解决. 经典的例子是电子在 Coulomb 场中的运动——类氢原子问题，以及电子在均匀磁场中的运动——Landau 能级问题. 电子在电磁场中运动的 Hamilton 量是

$$H = \frac{1}{2m}\left[-\mathrm{i}\,\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(x)\right]^2 + eA_0(x), \tag{3.1.1}$$

此处 $(A_0, \boldsymbol{A})$ 是电磁场的标量和矢量势. 在电动力学中电磁场强和势的关系是

$$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}, \quad \boldsymbol{E} = -\nabla A_0 - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}. \tag{3.1.2}$$

在势 $A_\mu(A_0, \boldsymbol{A})$ 的规范变换下，

$$A_\mu \to A_\mu + \partial_\mu \Lambda, \tag{3.1.3}$$

即

$$A_0 \to A_0 - \frac{1}{c}\frac{\partial \Lambda}{\partial t},$$

$$\mathbf{A} \to \mathbf{A} + \nabla\Lambda,$$

$\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{E}$ 是不变的. 表征变换的 Λ 是时空坐标的任意函数. 在经典电动力学中代表电磁场的是场强. 由于规范变换的自由，势与场强的关系不是一一对应，而是多对一关系. 实验直接确定的是场强. 在经典电动力学中势是有用的概念，但被认为是属于"导出的概念"(derived concept)一类. 在量子力学中，直接进入基本方程的是势，而不是场强. 在势的规范变换式(3.1.3)下，波函数必须作相应变化，即

$$\psi(x) \to \psi'(x) = \psi(x)\mathrm{e}^{(\mathrm{i}e/\hbar c)\Lambda(x)}, \tag{3.1.4}$$

才能使 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$$

保持不变. 规范变换式(3.1.3)，式(3.1.4)中 Λ 是时空坐标的任意函数，这种变换称定域(local)规范变换.

令 $\psi_0(\boldsymbol{x})$ 代表 $H_0 = \frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\,\hbar\nabla)^2 + eA_0$ 的本征函数，则它和 H 式(3.1.1)的本征函数 $\psi(\boldsymbol{x})$ 之间存在以下关系：

$$\psi(\boldsymbol{x}) = \psi_0(\boldsymbol{x})\exp\left[(+\mathrm{i}e/\hbar c)\int^{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}'\right]. \tag{3.1.5}$$

这个关系可以用直接代入方程 $H\psi = E\psi$ 而导致 $H_0\psi_0 = E\psi_0$ 得到验证. 式(3.1.5)指数上积分上限为 $\boldsymbol{x}$，下限可以选定任一空间点 $\boldsymbol{x}_0$ 作参考，这个下限在积分中就不标出了. 从参考点 $\boldsymbol{x}_0$ 到 $\boldsymbol{x}$ 的线积分在一般情况下是和路径有关的. 图 3.1 画出有磁通 Φ 穿过平面情况下从 $\boldsymbol{x}_0$ 到 $\boldsymbol{x}$ 的两条路径 1 和 2. 取沿不同路径的线积分之差，有

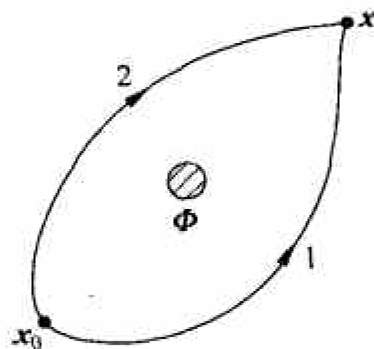


图 3.1 不可积相因子与路径有关

$$_1\int_{\boldsymbol{x}_0}^{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}' - {_2}\int_{\boldsymbol{x}_0}^{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}' = \left({_1}\int_{\boldsymbol{x}_0}^{\boldsymbol{x}} + {_2}\int_{\boldsymbol{x}}^{\boldsymbol{x}_0}\right)\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}'$$

$$= \oint \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}'.$$

用 Stokes 定理，它是

$$\oint \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}' = \int_S \nabla\times\boldsymbol{A}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} = \int_S \boldsymbol{B}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} = \Phi. \tag{3.1.6}$$

此处 S 是闭合路径所围的面积，面积元 $\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 的方向垂直于平面，$\boldsymbol{B}$ 是矢量势 $\boldsymbol{A}$ 所决定的场强，$\boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A}$. 磁通的存在使空间成为多联通的. 由于积分与路径有关，式(3.1.5)的相因子就不可能写成一个单值函数，这个相因子称为不可积相因子.

在量子力学中一个波函数的总体相因子(overall phase factor)是不进入任何可观测量

表达式的.因此可以任意地设置为 1.但如果波函数是由两部分叠加的,即

$$\psi = \psi_1 + \psi_2,$$

则 ψ_1 和 ψ_2 的相对相因子是十分重要的,因为它确定 ψ_1 与 ψ_2 的干涉.

1959 年 Y. Aharonov 和 D. Bohm 发表了一篇论文"量子理论中电磁势的意义"[1,2].考虑电子双缝衍射实验(图 3.2(a)).在缝后有一个很细的磁通量管,管内磁通为 Φ.这可以近似地用一个细长的螺线管来实现.磁场 $\boldsymbol{B}$ 被完全限制在管内,在管外各处 $\boldsymbol{B}=0$.管中磁通量的变化能影响屏幕上的干涉条纹吗?如果考虑到电子在衍射过程中没有感受到磁场 $\boldsymbol{B}$,干涉条纹似乎不应受 Φ 变化的影响.而如严格按量子力学分析,双缝平面后的电子波函数在 $\Phi=0$ 情况下是

$$\psi^{(0)}(\boldsymbol{x}) = \psi_1^{(0)}(\boldsymbol{x}) + \psi_2^{(0)}(\boldsymbol{x}), \tag{3.1.7}$$

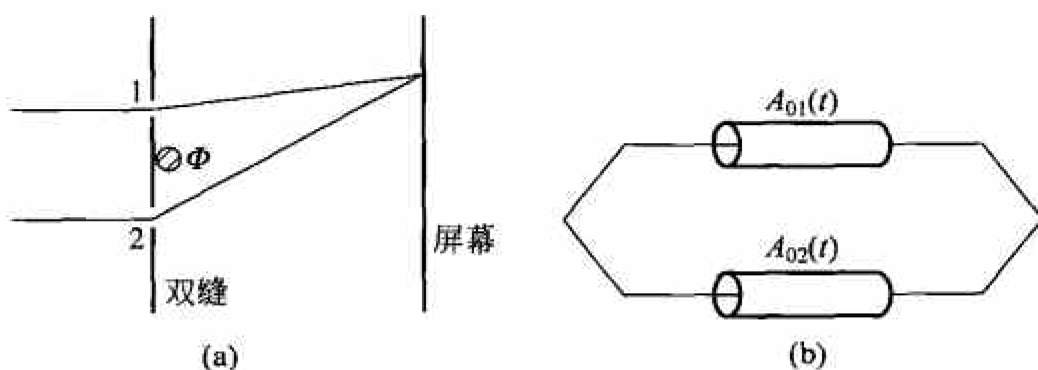


图 3.2 Aharonov-Bohm 效应

(a) 电子波通过有矢势的空间;(b) 电子波通过不同电压的导体圆筒

而在有通量 Φ 情况下是

$$\psi(\boldsymbol{x}) = \exp\left[(\mathrm{i}e/\hbar c)\int_{(1)}^{x}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}'\right]\psi_1^{(0)}(\boldsymbol{x}) + \exp\left[(\mathrm{i}e/\hbar c)\int_{(2)}^{x}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}'\right]\psi_2^{(0)}(\boldsymbol{x}). \tag{3.1.8}$$

在式中(1),(2)标出线积分路径通过狭缝 1 和 2.弃去式(3.1.8)中的一个总相因子,有

$$\psi(\boldsymbol{x}) = \psi_1^{(0)}(\boldsymbol{x}) + \exp\left[(\mathrm{i}e/\hbar c)\oint\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}'\right]\psi_2^{(0)}(\boldsymbol{x}) = \psi_1^{(0)}(\boldsymbol{x}) + \mathrm{e}^{(\mathrm{i}e/\hbar c)\Phi}\psi_2^{(0)}(\boldsymbol{x}).$$

和式(3.1.7)相比,相干两束波的相对相位差改变了 $\frac{e}{\hbar c}\Phi$,它称为 Aharonov-Bohm 相 S_{AB}:

$$S_{\mathrm{AB}} = \frac{e}{\hbar c}\Phi. \tag{3.1.9}$$

在 Φ 变化时,干涉条纹会有所移动,且 $\Delta\Phi=\frac{\hbar c}{e}2\pi=\frac{hc}{e}$ 时条纹变化一个周期,还原为 $\Delta\Phi=0$ 时的情况.

考虑电子分开的波束分别进入理想导体板制成的圆柱体,导体上施加电压 $A_{01}(t)$, $A_{02}(t)$(图 3.2(b)).电子在运动中并不感受到电场.但相应 Hamilton 量

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + eA_0(\boldsymbol{x},t) \\ H_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \end{aligned} \tag{3.1.10}$$

的 Schrödinger 方程的解 ψ 与 ψ_0 间有以下关系:

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\psi_0(\boldsymbol{x},t)\exp\left[(-\mathrm{i}e/\hbar c)\int^t \boldsymbol{A}_0(\boldsymbol{x},t')\mathrm{d}t'\right]. \tag{3.1.11}$$

用到图 3.2(b)的情况,相干的波函数是

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\psi_1^{(0)}(\boldsymbol{x},t)+\exp\left\{(-\mathrm{i}e/\hbar c)\int^t[\boldsymbol{A}_{02}(\boldsymbol{x},t')-\boldsymbol{A}_{01}(\boldsymbol{x},t')]\mathrm{d}t'\right\}\psi_2^{(0)}(\boldsymbol{x},t). \tag{3.1.12}$$

因此也应随 A_{01}, A_{02} 的变化观察到干涉条纹的移动.这种在无场强的情况下由电磁势 $(A_0,\boldsymbol{A})$ 的变化导致量子干涉条纹移动的效应,称为 Aharonov-Bohm 效应.

式(3.1.9)中的相对相因子是规范不变的.因为 Φ 决定于 $\boldsymbol{B}$,而 $\boldsymbol{B}$ 是规范不变的.式(3.1.12)中的相对相因子也是规范不变的,因为 A_{01} 和 A_{02} 改变相同的 $\frac{1}{c}\frac{\partial \Lambda}{\partial t}$,它们之差没有变化.这两种情况可以概括为一个统一的不可积相因子

$$\exp\left[(\mathrm{i}e/\hbar c)\int^x A_\mu \mathrm{d}x^\mu\right]=\exp\left[(\mathrm{i}e/\hbar c)\left(\int^x \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{x}'-\int^t \boldsymbol{A}_0(t')\cdot \mathrm{d}t'\right)\right]. \tag{3.1.13}$$

Aharonov-Bohm 效应的意义是深远的.它明确地显示:在量子理论中,对电磁现象而言,场强是欠定的(underdetermine),因为 Φ 变化时干涉条纹移动而场强却保持不变.以规范变换相联系的不同势函数却给出同样的相对相因子.相位 $\frac{e}{\hbar c}\int^x A_\mu \mathrm{d}x^\mu$ 相差 2π 的整数倍也给出同样的相因子.因此势对电磁现象是超定的(overdetermine).电磁现象由不可积相因子 $\exp\left[(\mathrm{i}e/\hbar c)\int^x A_\mu \mathrm{d}x^\mu\right]$ 完全决定,它包含了对电磁现象必要而充分地描述.这是吴大峻和杨振宁[3]在 1975 年表述的.

Aharonov-Bohm 效应强调了规范势的整体效应,即使场强定域地为 0. Aharonov-Bohm 相属于几何相,因为积分 $\int^x A_\mu \mathrm{d}x^\mu$ 不取决于任何运动速度,有别于动力学或运动学效应.它还是拓扑相,因为连续变化积分的封闭路径并不改变相位的值,只要这个变化不改变路径包围的磁通.应该着重说明的是,上面讨论的拓扑性质是由于磁通在二维平面上造成的奇点,使平面成为多连通域.从平面上一点出发经封闭路径回到这一点,路径按照是否包括奇点在内分类.它们在拓扑上是不等价的.拓扑的性质是二维的,即在垂直于 Φ 的平面上.三维空间的一个奇点并不具有这种性质.

Aharonov-Bohm 效应完全是从量子力学基本原理出发的,并未引入新的原理或假设,但同时又是出乎很多物理学家意料的. Feynman 在他的《物理讲座》中写道[4]:"像这样的东西就在我们周围 30 年之久①,却一直被忽视,是一件有趣的事.之所以被忽视,是由于存在一些定见,究竟什么是重要的,什么是不重要的."在 Schrödinger 方程中出现的是电磁势 $(A_0,\boldsymbol{A})$.在经典力学的 Lagrange 和 Hamilton 描述中 $(A_0,\boldsymbol{A})$ 同样出现,但在写出运动方程时它们就被 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 取代了.在量子力学发展过程中企图以 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 完全取代 $(A_0,\boldsymbol{A})$ 的尝试一直没有成功,这里原来蕴藏了深刻的原因.

Aharonov-Bohm 效应和磁通量子化有类似之处. 1961 年 Deaver 和 Fairbank,以及 Doll 和 Näbauer 发现中空超导体圆柱内通过的磁通是量子化的,磁通量子值为 $hc/2e$. N. Byers

① 指从量子力学建立到 1959 年这段时间.

和杨振宁[5]指出，这是在超导体内形成 Cooper 对的结果. 设 Cooper 对波函数① ψ 为

$$\psi = \sqrt{\rho}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}S}, \tag{3.1.14}$$

并设在图 3.3 所示的大块超导体内 ρ 为常数，S 为实函数. ψ 是正则动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\,\hbar\nabla$

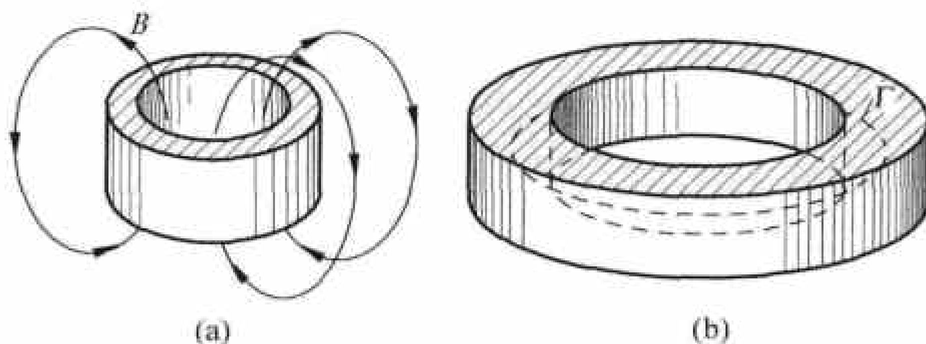


图 3.3 穿过超导环的磁通量子化
(a) 磁通穿过中空超导圆柱；(b) 封闭积分路径 Γ

的本征态：

$$\hat{\boldsymbol{p}}\psi = \hbar\sqrt{\rho}\,\nabla S\mathrm{e}^{\mathrm{i}S} = \hbar\nabla S\psi \tag{3.1.15}$$

本征值 $\hbar\nabla S$ 就是 Cooper 对的正则动量值. 因此其动力学动量 $2m\boldsymbol{v}$（m 是电子质量，$\boldsymbol{v}$ 为速度，Cooper 对质量为 $2m$）为

$$2m\boldsymbol{v} = \hbar\nabla S + 2\,\frac{e}{c}\boldsymbol{A}, \tag{3.1.16}$$

此处 e 是电子电荷的绝对值. 在超导环体内选一封闭路径 Γ 对式(3.1.16)积分，有

$$2m\oint_\Gamma \boldsymbol{v}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s} = \hbar\oint_\Gamma \nabla S\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s} + 2\,\frac{e}{c}\oint_\Gamma \boldsymbol{A}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s}. \tag{3.1.17}$$

超导圆柱厚度比穿透深度大得多，在 Γ 上 $\boldsymbol{v}=0$，因为超导电流只存在于表面上. Cooper 对波函数是单值的，故有

$$\oint_\Gamma \nabla S\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s} = 2\pi n, \tag{3.1.18}$$

即相角从一点出发沿 Γ 走一圈回到原处，其值只能变 $2\pi n$（n 为整数或 0）. 式(3.1.17)此时变为

$$\oint_\Gamma \boldsymbol{A}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s} = \Phi = \frac{\hbar c}{2e}2n\pi = \frac{hc}{2e}n. \tag{3.1.19}$$

Φ 是穿过柱心的磁通，它是磁通量子 $hc/2e$ 的整数倍. 由于 Meissner 效应，超导体内没有磁场. Cooper 对在超导体内没有感受到磁场，但其波函数的单值性却对电磁场的整体性质（穿过圆柱心的通量值）产生影响.

3.2 Aharonov-Bohm 效应的实验验证

Aharonov-Bohm 效应使许多物理学家感到震惊，也有不少人感到难以接受. 最早的验证来自 1960 年 R. G. Chambers 的实验[6]（图 3.4）. 点源发出的电子束入射到电子双棱镜上. 它的结构是两个接地平板间有一处于正电位的细丝. 入射的电子波从丝的两侧经过，被吸

① 请参阅本书 6.1 节和 9.3 节.

引而会聚发生干涉，在下面的平面上形成干涉图像. 一个直径约 1μm 的磁化铁尖细丝，在一端是锥状尖端，它内部及外面的磁力线示于图 3.4(b). 没有尖细丝时两束电子波会聚于垂直于双棱镜细丝的平面内. 由于尖细丝外的磁场，两侧的电子受到相反方向的磁场偏转力. 它们会聚的平面和双棱镜细丝不再垂直而成一定角度，因而干涉条纹就倾斜了(图 3.4(c)上面一对箭头). 在锥状尖端前言(没有磁通)和后侧(磁通限于尖细丝内)没有磁场，干涉条纹仍然平行于细丝. 中间的倾斜正好在两端和平行的条纹相连，表示了由于尖细丝内磁通产生的条纹移动.

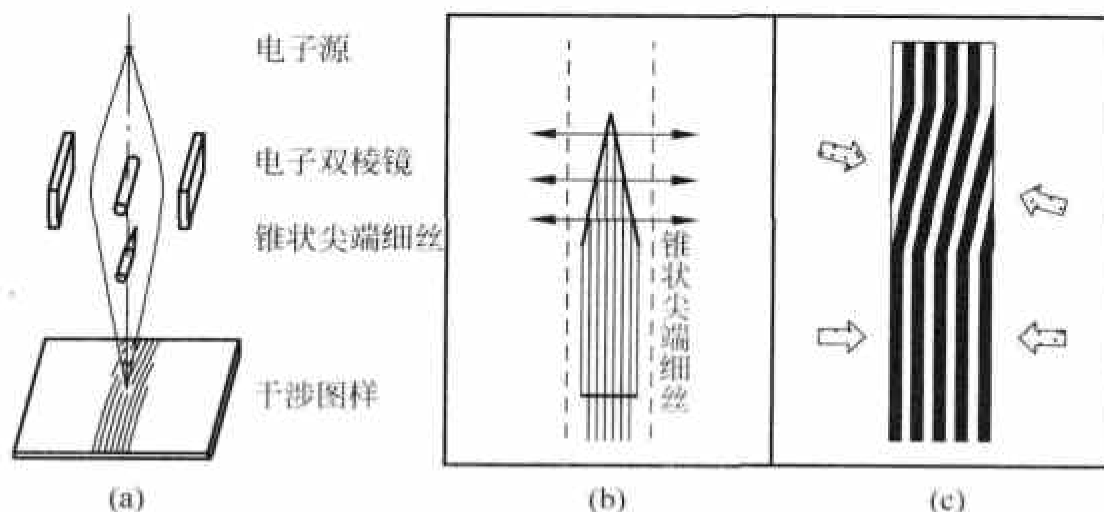


图 3.4　Chambers 实验

(a) 电子光学系统；(b) 细丝内及附近的磁力线；(c) 干涉条纹

Möllenstedt 和 Bayh 在 1962 年的实验[7]也用了电子双棱镜，而在两束电子波的中点放置细长的螺线管(图 3.5(a)). 他们用了一个巧妙的办法，使螺线管内电流连续增加(磁通随之连续增加)，同时使记录干涉条纹的底片连续移动，并用一个细缝使干涉图样只有一小部分落在底片上. 这样便把磁通从 0 增到最大值的过程中导致的条纹移动连续记录下来了(图 3.5(b)). 条纹倾斜缘于磁通变化产生了感应电场. 在磁通停止增加后条纹相对于原来位置有了移动，这说明了 Aharonov-Bohm 效应的存在.

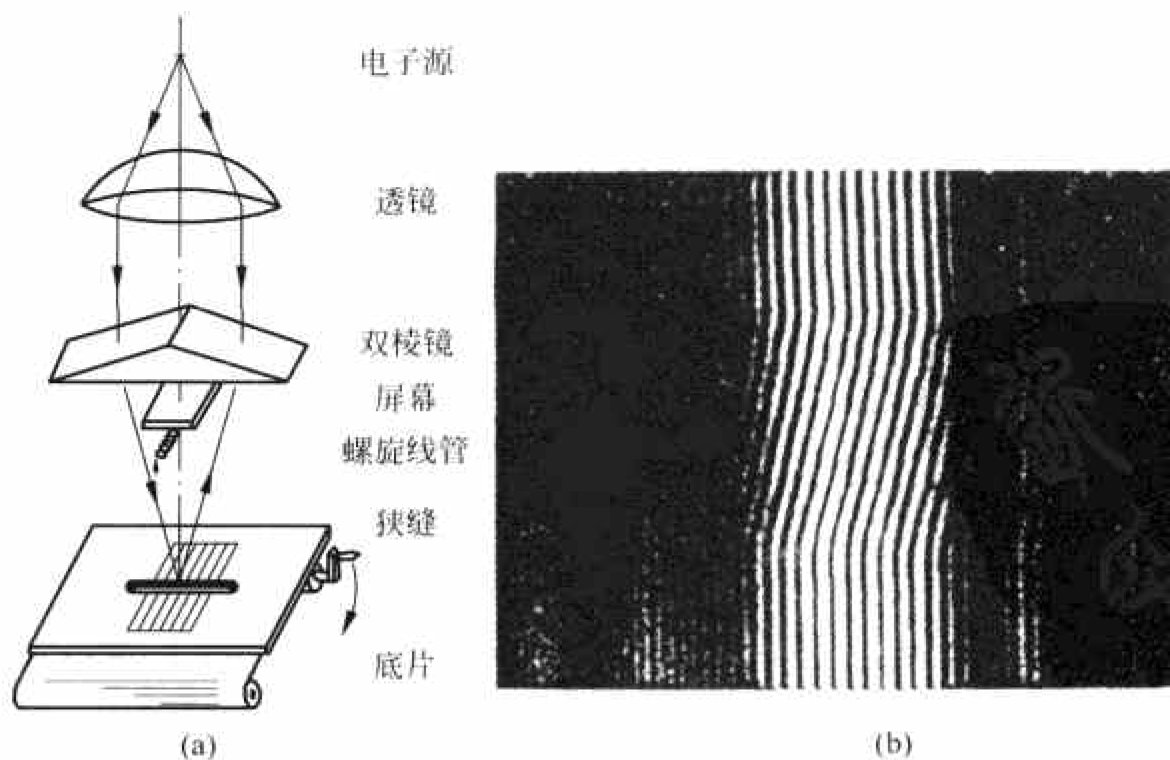
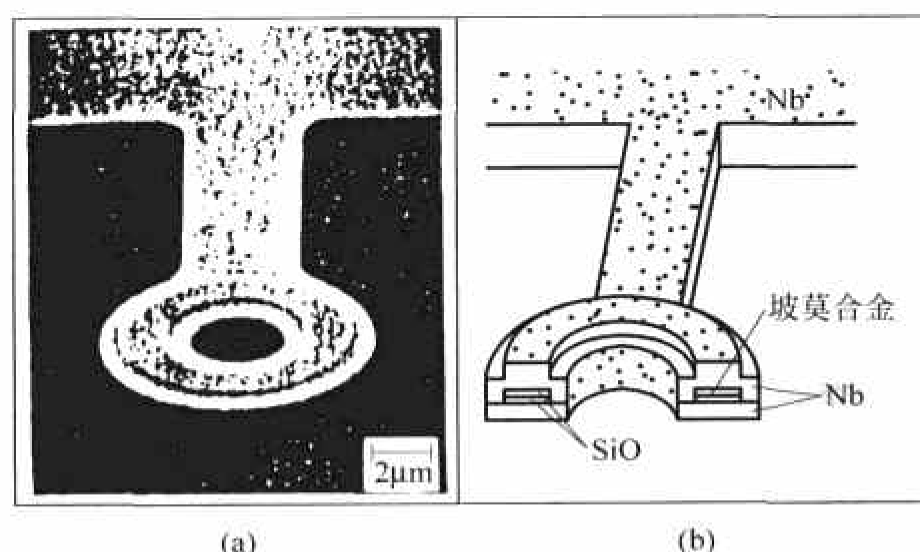


图 3.5　Möllenstedt 和 Bayh 实验

(a) 电子光学系统示意图；(b) 干涉图像

自从 Aharonov-Bohm 效应提出以来，在 30 年的过程中争论始终不断. 一方面有许多工作集中在对实验的重新解释上. 由于磁体的磁力线一般总要外泄，螺旋管的磁通在两端也要在空间中散开，电子也会进入螺线管等，这就有可能把观察到的效应和这些问题联系起来. 另外一些理论则设法从根本上推翻 Aharonov-Bohm 效应，甚至宣称它是"数学的编造"①. 一直到 1986 年情况发生了根本的变化. "判定性"的实验是殿村(A. Tonomura)和他的合作者用超导体包围的环形磁体所作的电子全息干涉图[8,9]. 这项研究充分反映了实验技术和工艺对基础物理研究的重要作用. 用光刻微制造工艺及真空蒸发工艺制备了完全由超导体 Nb 包围的小环形坡莫合金磁体，厚度是 200Å，Nb 层厚 2500Å(图 3.6). 制备完了之后将磁体从 Nb 桥上切下(桥是为了保证在制造过程中良好的导热). 另在磁体外蒸镀一层 500～2000Å 厚的铜. 在实验时处于超导的 Nb 因 Meissner 效应将磁通全都限在坡莫合金磁体内，而铜金属层能阻挡电子进入. 这两个问题正是许多对 Aharonov-Bohm 效应持怀疑态度的物理学家意见集中之处. 电子全息图②是用图 3.7(a)所示的设备摄取的. 150kV 场发射电子显微镜(电子 de Broglie 波长 0.030Å)提供高度相干电子波源. 这是用良好的准直度(准直角度 10^{-8} rad)保证的. 和热电子源相比，使电子双棱镜产生的干涉条纹数从 300 增至 3000. 电子波的一半通过样品，环内和环外的波产生了相差，这部分称为"物波". 另一半称为"参考波". 物波和参考波通过电子双棱镜后交叠而产生干涉图样. 由于通过环内和环外的物波有相差，它们和参考波产生的干涉条纹就有了相对移动. 产生了全息图之后还要进行重构. 重构是用 He-Ne 激光进行的，见图 3.7(b)③殿村研究组检验了磁通漏泄. 用干涉电子显微术进行测量，只选用通量 $<hc/20e$ 的封闭环形磁体. 注意这是在常温下的数值. 当 Nb 进入超导态后磁通漏泄的值当比这个值要小得多，Nb 厚度是 2500Å，而磁场的穿透深度只有 1100Å. 关于电子可能进入有磁场区域的估计，由于 Cu 层和 Nb 层厚度分别约是 1000Å 和 2500Å，只有 10^{-6} 的电子波能进入. Cu 层能有效阻止电子进入，也可以从 Cu 层厚度从 500Å 变到 2000Å 时超导 Nb 包围磁体的干涉图像没有变化得到证实.



(a) (b)

图 3.6 殿村实验所用的环形磁体

(a) 环形磁体的扫描电子显微图；(b) 结构示意图

① 请参阅文献[1]p51 和 Tonomura(殿村)的文章.

② 和光学全息学相类似，电子全息学用电子形成全息图. 在重构干涉图像时用光学方法. 电子全息方法是由殿村发展的[11]，关于原理的介绍可参阅文献[1].

③ 关于重构不在此叙述了，请参阅文献[1]，[9].

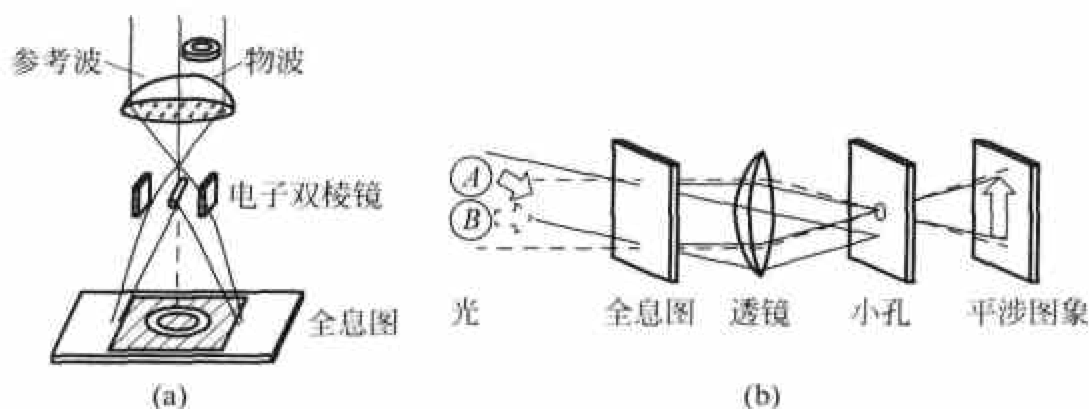


图 3.7　电子全息干涉图

(a) 电子光学系统；(b) 全息图激光重构

用超导 Nb 包围的磁体所产生的电子全息干涉图示于图 3.8. 虽然原来磁体的磁通量在连续范围内变化，但在环外和环内通过的电子波与参考波的干涉条纹相差或是 π(上图)或是 0(下图). 这可以从环孔内外干涉条纹的移动看到. 图中虚线是为了帮助看清楚条纹移动画上的. 磁通 Φ 产生的相差是 $\frac{e}{\hbar c}\Phi=\pi\frac{\Phi}{hc/2e}$，当 $\Phi=n\frac{hc}{2e}$ 时相差是 $n\pi$. 因此超导体包围的磁通量子化只能给出相差 π(n 为奇)或 0(n 为偶). 如在实验中将样品温度升到 Nb 超导临界温度 T_c(9.2K)之上时，干涉条纹移动立刻发生变化，例如图 3.9 相当于 $\Phi=(0.32+2n)\pi$. 从 $T<T_c$ 到 $T>T_c$，干涉图的变化完全是可逆的. 这个系列的实验不仅验证了 Aharonov-Bohm 效应，也印证了超导体包围的磁通是量子化的. 此外，用殿村的方法还能直接观测单个磁通量子[1]. 以上讨论了几个实验，专著[1]有更详细的介绍.

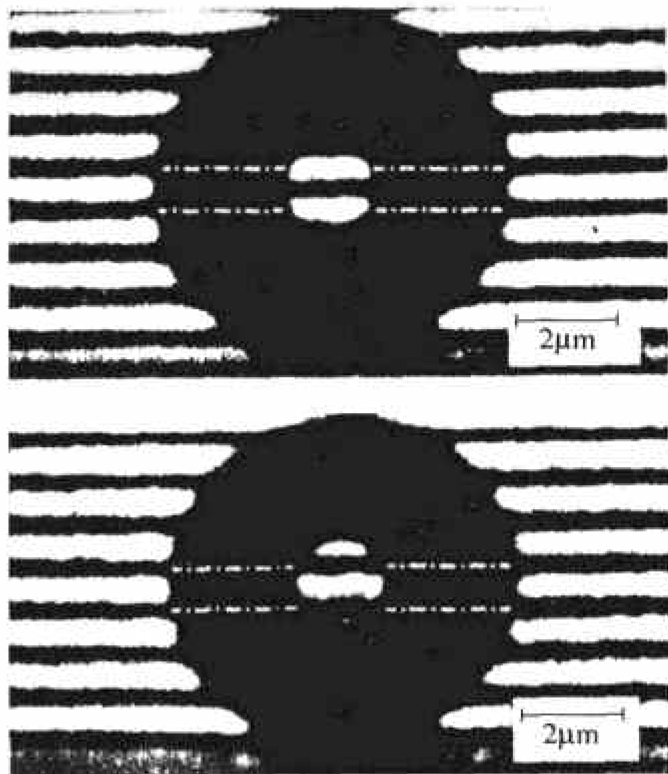


图 3.8　超导 Nb 包围的环状磁体的电子全息干涉图

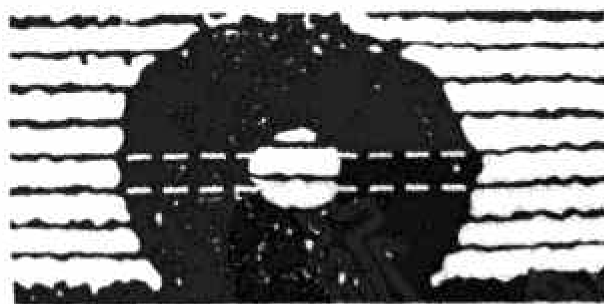


图 3.9　$T=15$K 时一个样品的电子全息干涉图(相位放大 2 倍)

3.3　Aharonov-Casher 效应

产生 Aharonov-Bohm 效应的长螺线管可以看作是许多磁偶极矩沿轴线垒积而成. 电子沿螺线管两侧不同路径会获得不同相位(图 3.10(a)). 根据电磁理论的对偶性，将磁偶极矩

换成沿轴的电荷，而一中性粒子（例如中子）带有磁矩（与轴平行），在线电荷两侧不同路径通过（图 3.10(b)）也会获得不同相位. 这是 Y. Aharonov 和 A. Casher 在 1984 年提出的[10]. 这里有一个细致的问题. 磁矩在运动中会感到线电荷的磁场，但它的方向由 $\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{E}$ 决定. $\boldsymbol{E}$ 在直线垂直的平面内，磁矩的速度也在这个平面内. 因此 $\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{E}$ 和直线平行，亦即与磁矩平行，所以磁矩不受力. 考虑一个螺线管（质量为 M，位于 $\boldsymbol{R}$，速度为 $\mathbf{V}$）和一带电粒子（质量为 m，位于 $\boldsymbol{r}$，速度为 $\boldsymbol{v}$）相互作用. 体系的 Lagrange 量是

$$L=\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2+\frac{1}{2}M\boldsymbol{V}^2+\frac{e}{c}\mathbf{A}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})\cdot(\boldsymbol{v}-\boldsymbol{V}). \tag{3.3.1}$$

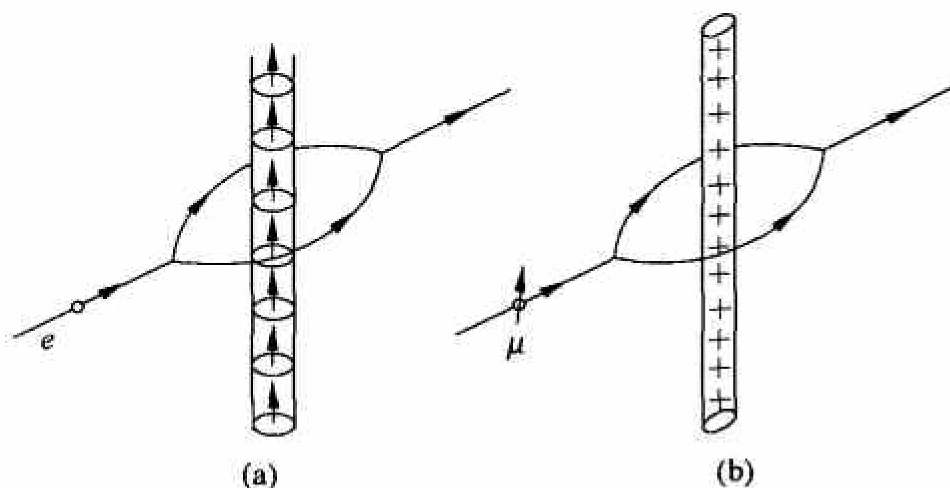


图 3.10 Aharonov-Bohm 效应和它的对偶 Aharonov-Casher 效应

它导致的粒子运动方程是

$$m\dot{v}_j+\frac{e}{c}\frac{\partial}{\partial r_i}A_j(v_i-V_i)-\frac{e}{c}\frac{\partial}{\partial r_j}A_i(v_j-V_j)=0,$$

即

$$m\dot{\boldsymbol{v}}=\frac{e}{c}(\boldsymbol{v}-\boldsymbol{V})\times(\nabla_r\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})). \tag{3.3.2}$$

类似地还可得到螺线管的运动方程，$-M\dot{\boldsymbol{V}}$ 正好等于式(3.3.2)的右方，即

$$M\dot{\boldsymbol{V}}+m\dot{\boldsymbol{v}}=0, \tag{3.3.3}$$

因此有

$$M\boldsymbol{V}+m\boldsymbol{v}=\text{const.} \tag{3.3.4}$$

Lagrange 量和运动方程都是 Galilei 不变和平移不变的. 从式(3.3.1)有

$$\boldsymbol{p}=\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{v}}=m\boldsymbol{v}+\frac{e}{c}\mathbf{A},$$

$$\boldsymbol{P}=\frac{\partial L}{\partial\boldsymbol{V}}=M\boldsymbol{V}-\frac{e}{c}\mathbf{A}. \tag{3.3.5}$$

由此，并用式(3.3.4)得

$$\boldsymbol{p}+\boldsymbol{P}=m\boldsymbol{v}+M\boldsymbol{V}=\text{const}, \tag{3.3.6}$$

即动量守恒. 在 Lagrange 量(3.3.1)式中并没有明显显示出 m 和 M 哪一个是电荷，哪一个是磁矩，$\boldsymbol{A}$ 只与相对位置矢量 $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}$ 有关. 系统有互换对偶性，L 描述的也可以是在 $\boldsymbol{R}$ 处质量为 M 的电荷和在 $\boldsymbol{r}$ 处质量为 m 的磁矩，在两种情况下螺线管的方向是相同的. 因此一个磁矩在直线均匀带电体的场中运动时不感到受力，但在两侧通过的波会有一个相差，即

Aharonov-Casher 相：

$$S_{AC} = -\oint \frac{e}{\hbar c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}) \cdot d\boldsymbol{R} = \frac{e}{\hbar c}\Phi. \tag{3.3.7}$$

由于通量 Φ 就是偶极矩 μ 除以螺线管长度 ξ，有

$$S_{AC} = \frac{1}{\hbar c}\frac{e}{\xi}\mu = \frac{1}{\hbar c}\lambda\mu.$$

此处 λ 是电荷的线密度. 中子的磁矩是 $g\frac{e\hbar}{2Mc}$，故有

$$S_{AC} = \frac{\lambda}{e} g 2\pi\alpha \frac{\hbar}{Mc}, \tag{3.3.8}$$

$\alpha = e^2/4\pi\hbar c$ 是精细结构常数，作一估计：$g=O(1)$，Compton 波长 $\frac{\hbar}{Mc}=2\times10^{-14}$ cm. 如要产生易观测到的相差 $S_{AC}=\pi/2$，则所需的电荷线密度甚大：

$$\lambda \approx e/10^{-15}(\text{cm}^{-1}). \tag{3.3.9}$$

因此在实验室条件下所能观察到的相移是很小的. Melbourne 大学和 Missouri 大学合作研究组在 1989 年报道了观测结果[11]. 他们用反应堆热中子，使之进入硅晶体中子干涉仪，两臂之间有一中央电极置于 45kV. 该装置示于图 3.11. 对于这个装置，理论预计的相差是 1.5mrad. 为了积累足够的中子计数，数据获取用了几个月时间. 最后的结果是(2.19±0.52)mrad.

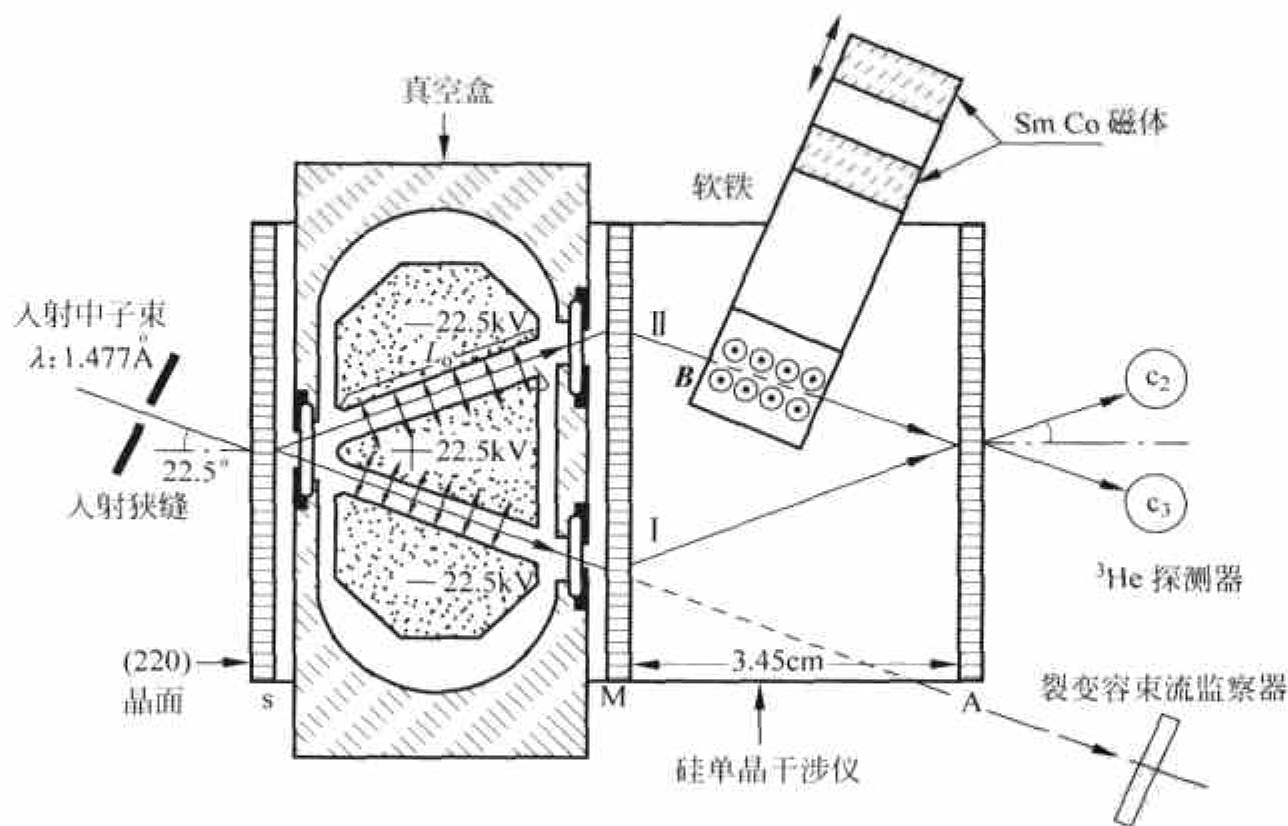


图 3.11 中子束干涉仪中的剖面图

3.4 平行输运，连络，曲率和非完整性

在物理学中首先应用微分几何概念的是 Einstein 的广义相对论. 规范场理论以其内部对称性提供了更丰富的与微分几何-纤维丛的联系.

H. Weyl 在广义相对论建立的引力与几何的关系鼓舞下，在 1919—1921 年企图赋予电

磁场以几何意义. 他设想时空各点都有不同的尺度. 从一点 x^μ 到 $x^\mu+\mathrm{d}x^\mu$，尺度变化为 $1+S_\mu\mathrm{d}x^\mu$. 今有时空坐标函数 $f(x)$，在从 x^μ 到 $x^\mu+\mathrm{d}x^\mu$ 时它的变化是

$$f(x)\rightarrow(f+\partial_\mu f\mathrm{d}x^\mu)(1+S_\mu\mathrm{d}x^\mu)\approx f+(\partial_\mu+S_\mu)f\mathrm{d}x^\mu. \tag{3.4.1}$$

Weyl 企图把尺度函数 S_μ 和电磁势 A_μ 联系起来，然而他的努力未获成功. 量子力学诞生之后，人们了解到在 Hamilton 量中有 $\left(-\mathrm{i}\partial_\mu-\frac{e}{c}A_\mu\right)$ 作为动力学动量算符. 和式(3.4.1)相比，原来 S_μ 和 $\mathrm{i}A_\mu$ 相当. 电磁势并未提供一个实的尺度，而是由于虚数 i 使它与式(3.1.13)的不可积相因子有关. Weyl 在此基础上发展了电磁场的规范不变性理论，然而他并没有改变原来用于"尺度"不变性(gauge invariance)的名词，这个词就沿用至今了.

在弯曲空间中首先要介绍"平行输运"①的概念. 在任何空间中要比较不同点处的矢量场 $V_\mu(x)$ 和 $V_\mu(x')$，先要把 V_μ 从 x"平行输运"移到 x'. 在平直空间，这不需要特殊定义(图 3.12(a)). 假如空间是弯曲的，坐标轴在各点都不相同，平行输运的定义就是：将矢量移动时要使它保持与路径的切线间的角度不变. 平行移到 x' 之后矢量场变为 $V_\mu+\delta V_\mu$. 如 $x'=x+\mathrm{d}x$，δV_μ 就线性依赖 V^ν 和 $\mathrm{d}x^\lambda$：

$$\delta V_\mu=\Gamma^\nu_{\mu\lambda}V_\nu\mathrm{d}x^\lambda. \tag{3.4.2a}$$

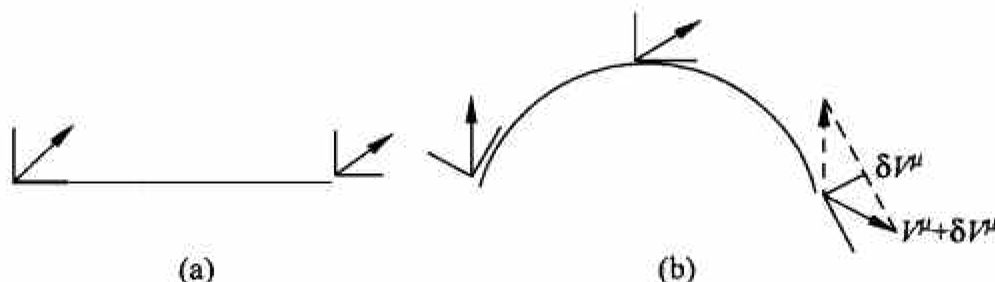


图 3.12 平行输运
(a) 平直空间；(b) 弯曲空间

式(3.4.2a)是 $\Gamma^\nu_{\mu\lambda}$ 的定义，它被称为仿射连络，是时空坐标函数. 对平直空间，$\Gamma^\nu_{\mu\lambda}=0$. 由 $\delta(V_\mu V^\mu)=0$，有

$$\delta V^\mu=-\Gamma^\mu_{\nu\lambda}V^\nu\mathrm{d}x^\lambda. \tag{3.4.2b}$$

在 x 和 $x+\mathrm{d}x$ 两点间矢量场的协变微分记为 $\mathrm{D}V_\mu$，定义是

$$\begin{aligned}\mathrm{D}V_\mu&=V_\mu(x+\mathrm{d}x)-[V_\mu(x)+\delta V_\mu]\\&=(\partial_\lambda V_\mu-\Gamma^\nu_{\mu\lambda}V_\nu)\mathrm{d}x^\lambda\end{aligned} \tag{3.4.3}$$

括弧中的量称为协变导数或协变微商. 等价地有

$$\begin{aligned}\mathrm{D}V^\mu&=V^\mu(x')-[V^\mu(x)+\delta V^\mu]\\&=(\partial_\lambda V^\mu+\Gamma^\mu_{\nu\lambda}V^\nu)\mathrm{d}x^\lambda.\end{aligned} \tag{3.4.4}$$

通过将一个矢量沿一个封闭曲线平行移动可以定义曲率. 图 3.13(a)是平直空间，平行输运矢量 1→2→3→4 没有变化. 而在球面上(图 3.13(b))相应的平行输运回到起点，矢量转了 $\pi/2$. 讨论一般情况，在图 3.14 中从 P 出发沿 PP_1P_2 和沿 PP_3P_2 平行输运矢量 V_μ 将得到不同结果. 图中 PP_1 是矢量 a^α，PP_3 是 b^β，P_1P_2 是平行输运的 b，即 $b+\delta b$，此处 δb 是

$$\delta b^\beta=-\Gamma^\beta_{\varepsilon\eta}b^\varepsilon\mathrm{d}x^\eta. \tag{3.4.5}$$

① 平行输运(parallel transport)在文献中也称平行位移(parallel displacement).

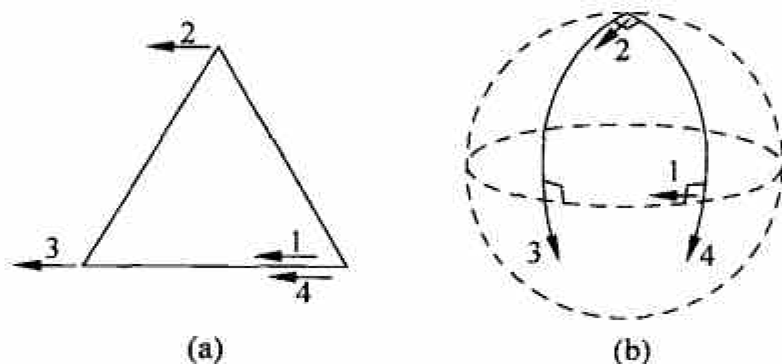


图 3.13　沿封闭曲线平行输运矢量
(a) 平直空间；(b) 球面

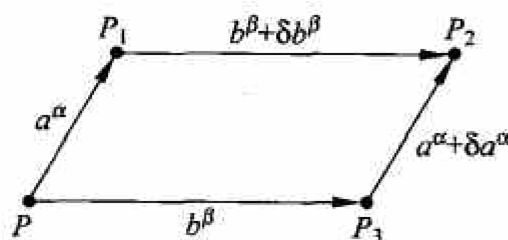


图 3.14　沿不同路径平行输运矢量场

P_3P_2 是平行输运的 a，即 $a+\delta a$，此处 δa 是

$$\delta a^\alpha = -\Gamma^\alpha_{\xi\eta} a^\xi \mathrm{d}x^\eta. \tag{3.4.6}$$

经 PP_1P_2 输运的矢量场其输运的变化是

$$\delta V_\mu = (\Gamma^\nu_{\mu\alpha} V_\nu)_P a^\alpha + (\Gamma^\nu_{\mu\beta} V_\nu)_{P_1} (b^\beta + \delta b^\beta). \tag{3.4.7}$$

经过 PP_3P_2 输运的矢量场其输运的变化是

$$\delta V'_\mu = (\Gamma^\nu_{\mu\beta} V_\nu)_P b^\beta + (\Gamma^\nu_{\mu\alpha} V_\nu)_{P_3} (a^\alpha + \delta a^\alpha). \tag{3.4.8}$$

在 P_1 和 P_3 处取值的$(\Gamma^\nu_{\mu\beta}V_\nu)$可以通过在 P 处取值的量表示：

$$\begin{aligned}(\Gamma^\nu_{\mu\beta} V_\nu)_{P_1} &= (\Gamma^\nu_{\mu\beta} + \partial_\alpha \Gamma^\nu_{\mu\beta} a^\alpha)(V_\nu + \Gamma^\sigma_{\mu\alpha} V_\sigma a^\alpha), \\ (\Gamma^\nu_{\mu\alpha} V_\nu)_{P_3} &= (\Gamma^\nu_{\mu\alpha} + \partial_\beta \Gamma^\nu_{\mu\alpha} b^\beta)(V_\nu + \Gamma^\sigma_{\mu\beta} V_\sigma b^\beta).\end{aligned} \tag{3.4.9}$$

将式(3.4.5)，式(3.4.6)，式(3.4.9)代入式(3.4.7)，式(3.4.8)，并取其差，得

$$\Delta V_\mu = \delta V_\mu - \delta V'_\mu = R^\nu_{\mu\alpha\beta} V_\nu a^\alpha b^\beta, \tag{3.4.10}$$

此处

$$R^\nu_{\mu\alpha\beta} = \partial_\alpha \Gamma^\nu_{\mu\beta} - \partial_\beta \Gamma^\nu_{\mu\alpha} + \Gamma^\lambda_{\mu\beta}\Gamma^\nu_{\lambda\alpha} - \Gamma^\lambda_{\mu\alpha}\Gamma^\nu_{\lambda\beta}. \tag{3.4.11}$$

式(3.4.10)表明沿不同路径平行输运矢量变化之不同 ΔV_μ 与路径所围面积 $\sigma^{\alpha\beta}=a^\alpha b^\beta$ 以及被输运的矢量 V_μ 成正比，而比例常数就是曲率张量 $R^\nu_{\mu\alpha\beta}$(式(3.4.11))。

Abel 规范场(例如电磁场)情况下 Fermi 子波函数的协变微商是

$$\mathrm{D}_\mu \psi = \left(\partial_\mu + \mathrm{i}\frac{e}{c} A_\mu\right)\psi. \tag{3.4.12}$$

非 Abel 规范场情况下①有

$$\mathrm{D}_\mu \psi = (\partial_\mu + \mathrm{i}gA_\mu)\psi, \tag{3.4.13}$$

此处 ψ 为一具有内部对称性的 n 分量波函数。例如对 $SU(2)$对称，它是二分量波函数。A_μ 是 $n\times n$ 矩阵。对 $SU(2)$对称，它是 $A_\mu=\frac{\tau^a}{2}A^a_\mu, a=1,2,3$；对重复指标求和。$\tau^a$ 就是 Pauli 矩阵。从 x 到 $x+\mathrm{d}x$ 平行输运 ψ 带来的变化是

$$\delta\psi = \mathrm{i}gA_\mu \psi \mathrm{d}x^\mu. \tag{3.4.14}$$

和式(3.4.4)类比，规范势就相当于仿射连络，而从 x 到 x'的变化是

$$P(x', x)\psi = \exp\left[\mathrm{i}g\int_x^{x'} A_\mu(y)\mathrm{d}y^\mu\right]\psi. \tag{3.4.15}$$

---

① 本书 7.6 节有关于非 Abel 规范场的介绍，此处只从数学关系了解即可。

由于 $A_\mu=\frac{\tau^a}{2}A_\mu^a$,而$\frac{\tau^a}{2}$正是 $SU(2)$群的生成元,每一个路径 $x\to x'$就相当于一个 $SU(2)$群元素. $P(x',x)$正是不可积相因子,它就相当于平行输运. 在非 Abel 规范场理论中,规范场强和规范势的关系是

$$F_{\mu\nu}=\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu-[A_\mu,A_\nu], \tag{3.4.16}$$

此处 $F_{\mu\nu}$和 A_μ 一样,也是 $n\times n$ 矩阵. 将式(3.4.16)和式(3.4.11)相比,规范场强就相当于曲率,规范场理论几何意义的讨论涉及纤维丛理论. 文献[3]中将规范场和纤维丛的概念作了对应.

Aharonov-Bohm 相实际上也是一个平行输运的例子. 电子所在的空间没有场强,但有规范势. 没有场强,空间曲率为 0,是平直的. 在磁通管周围的空间相应于一个圆锥面,各处曲率为 0,除去其顶点之外. 在顶点处曲率为∞,这是磁通集中之处 Aharonov-Bohm 相因子就是在锥面上绕一周的平行输运. 如图 3.15(a),圆锥面可以沿通过顶点 A 的虚线切开展成平面(如图 3.15(b)). 在平面上的矢量平行输运不会导致它旋转. 但在虚线上的一点Ⓟ在锥面展开后却在锲面上成为两点(仍标为Ⓟ). 矢量沿 C 输运一周后和初始位置差了 α 角,即圆锥的锲角,它的值和磁通量有关. 这个角称为非完整角(又译为非和乐角. holomoy 音译"和乐",完整之意). 封闭曲线 C 可以任意扭曲,只要不触及奇点 A,绕行一周的角度非完整仍是 α. 因此这是一个拓扑效应.

另一个非完整现象是 Foucault 摆. 它摆动的方向以单位矢量$\hat{e}$表示. 它总是和所在地的铅直线(实际是地心到当地连线方向的单位矢量$\hat{r}$)保持垂直,并必须满足约束条件: 即不能沿$\hat{r}$转动. 当一昼夜后$\hat{r}$矢量转了一圆(沿当地的纬度小圆 C),$\hat{e}$却没有回到起始的方向(图 3.16 中 $\boldsymbol{e}_i$和 $\boldsymbol{e}_f$ 分别是起始和终结方向). 这种"局域没有变化(指$\hat{e}$和$\hat{r}$保持垂直,不沿$\hat{r}$转动)却带来整体的变化(指$\hat{e}$转一圆后与起始值差一个角度)"就是$\hat{e}$在球面上平行输运一周所导致的角度非完整性. $\hat{e}$输运一周角度之差等于 C 在地心处所张的立体角:

$$\Omega=2\pi(1-\cos\theta)=2\pi(1-\sin\phi),$$

此处 θ 是小圆的极角,ϕ 是纬度. 这个角度非完整和沿 C 转一圈的速率无关,因此是几何相,但与立体角大小有关,因此不是拓扑效应.

本节内容请参阅文献[12].

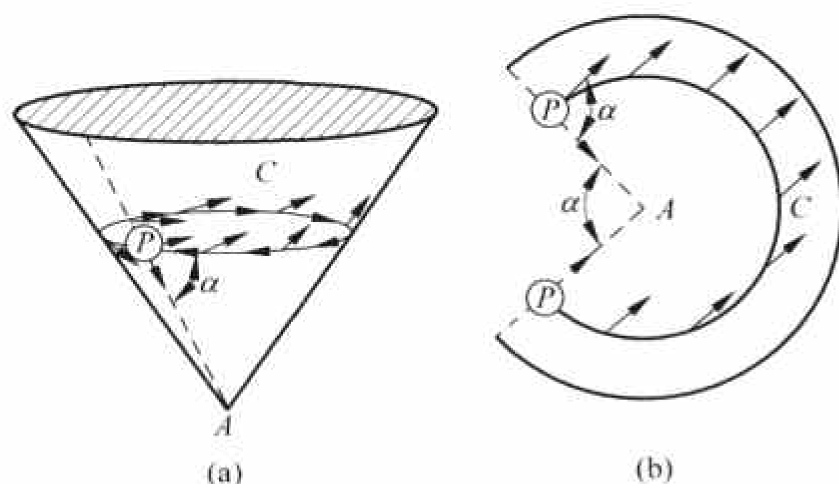


图 3.15 在圆锥面上矢量的平行输运

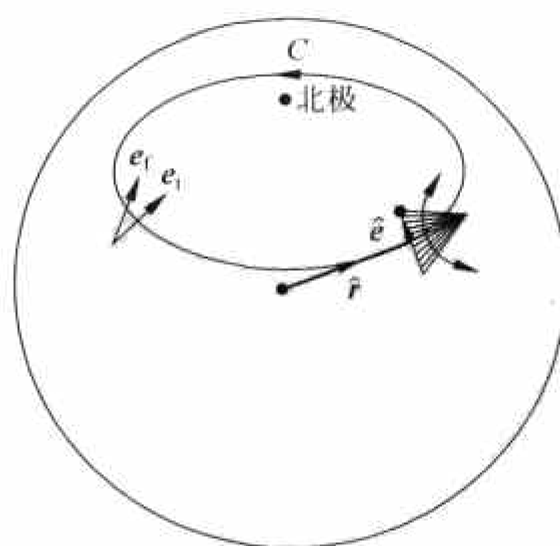


图 3.16 $\hat{e}$的平行输运一周带来的角度非完整

3.5 Berry 相

在一些量子力学问题中可以把力学量分为两个集合. 一个集合是随时间快变化的, 一个集合是随时间慢变化的. 在解这类复杂体系问题时, 可先将慢变量固定, 解有关快变量的量子力学问题, 然后允许慢变量变化, 得到整个体系的解. Born-Oppenheimer 近似就是用这个方法解分子问题的. 令 $\boldsymbol{P},\boldsymbol{R}$ 为慢变量(例如原子核的动量及位置), $\boldsymbol{p},\boldsymbol{r}$ 为快变量(例如电子的动量和位置). 体系的 Hamilton 量是

$$H = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M} + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}). \tag{3.5.1}$$

先将慢变量冻结. 快问题的 Hamilton 量是

$$h = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}), \tag{3.5.2}$$

此处 $\boldsymbol{R}$ 是作为参数出现的. 设 h 的能量本征问题已经解决:

$$h(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})\mid m;\boldsymbol{R}\rangle = \varepsilon_m(\boldsymbol{R})\mid m;\boldsymbol{R}\rangle, \tag{3.5.3}$$

此处 $|m;\boldsymbol{R}\rangle$ 是快问题的一个本征态, 量子数为 m, $\boldsymbol{R}$ 作为参数进入本征矢及本征值. $|m;\boldsymbol{R}\rangle$ (不同的 m)组成分立、非简并态的正交归一完备集. 现在将 $\boldsymbol{R}$ 当作随 t 慢变化的参数, 求快变量问题中波函数随时间的演化. Schrödinger 方程是

$$\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = h\psi. \tag{3.5.4}$$

将 ψ 用 $|m;\boldsymbol{R}\rangle$ 展开:

$$\psi = \sum_m a_m(t)\exp\left[-\mathrm{i}/\hbar\int_0^t \varepsilon_m(t')\mathrm{d}t'\right]\mid m;\boldsymbol{R}\rangle, \tag{3.5.5}$$

指数因子是动力学相因子, ε_m 随时间的变化是由参数 R 随时间的慢变化造成. 将式(3.5.5)代入式(3.5.4)并用式(3.5.3), 将结果从左方乘以 $\langle k;\boldsymbol{R}|$, 就得到展开系数 $a_m(t)$ 的时间微商①

$$\dot{a}_k(t) = -\sum_m a_m\left\langle k;\boldsymbol{R}\left|\frac{\partial}{\partial t}m;\boldsymbol{R}\right.\right\rangle\exp\left\{-\mathrm{i}/\hbar\int_0^t[\varepsilon_m(t')-\varepsilon_k(t')]\mathrm{d}t'\right\} \tag{3.5.6}$$

$\frac{\partial}{\partial t}\Big|m;\boldsymbol{R}\rangle$ 可以用式(3.5.3)通过 $\frac{\partial h}{\partial t}$ 表示: 将式(3.5.3)对 t 微商, 并从左方乘以 $\langle k;\boldsymbol{R}|$, 对 $k\neq m$ 情况就得到

$$\left\langle k;\boldsymbol{R}\left|\frac{\partial}{\partial t}m;\boldsymbol{R}\right.\right\rangle = \frac{1}{\varepsilon_m-\varepsilon_k}\left\langle k;\boldsymbol{R}\left|\frac{\partial h}{\partial t}\right|m;\boldsymbol{R}\right\rangle,\quad k\neq m. \tag{3.5.7}$$

对 $k=m$, 则从归一化条件 $\langle k;\boldsymbol{R}|k;\boldsymbol{R}\rangle=1$ 得

---

① 对定态问题 Schrödinger 方程的解是

$$\psi = \sum_m a_m \mathrm{e}^{-(\mathrm{i}/\hbar)E_m t}\mid m\rangle,$$

此处 a_m 与 t 无关. 但在当前问题中 $|m;\boldsymbol{R}\rangle$ 通过 $\boldsymbol{R}$ 与 t 有关, 因此 $\exp\left[-\mathrm{i}/\hbar\int_0^t\varepsilon_m(t')\mathrm{d}t'\right]|m;\boldsymbol{R}\rangle$ 并不满足 Schrödinger 方程. 在展开式(3.5.5)中 a_m 就必须是 t 的函数. 从式(3.5.6)看 $\dot{a}$ 不为 0 是因为 $\frac{\partial}{\partial t}|m;\boldsymbol{R}\rangle$ 的存在.

$$\left\langle k;\boldsymbol{R}\left|\frac{\partial}{\partial t}k;\boldsymbol{R}\right.\right\rangle+\left\langle\frac{\partial}{\partial t}k;\boldsymbol{R}\left|k;\boldsymbol{R}\right.\right\rangle=0,$$

即

$$\left\langle k;\boldsymbol{R}\left|\frac{\partial}{\partial t}k;\boldsymbol{R}\right.\right\rangle=\mathrm{i}\alpha_k(t), \tag{3.5.8}$$

上式右边为纯虚数. 设体系在 $t=0$ 时位于某定态 $|n;\boldsymbol{R}(0)\rangle$，即 $a_m(0)=\delta_{mn}$. 问在有限时间体系在不同状态上的几率振幅是什么？设对 $k\neq n$ 各态，式(3.5.6)右方随时间缓变各量为常数，用式(3.5.7)和 $a_m=\delta_{mn}$，得

$$\dot{a}_k=\frac{1}{\varepsilon_k-\varepsilon_n}\left\langle k;\boldsymbol{R}\left|\frac{\partial h}{\partial t}\right|n;\boldsymbol{R}\right\rangle\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\varepsilon_k-\varepsilon_n)t\right],\quad k\neq n.$$

积分后有

$$a_k(t)\approx\frac{1}{\mathrm{i}\,\hbar(\varepsilon_k-\varepsilon_n)^2}\left\langle k;\boldsymbol{R}\left|\frac{\partial h}{\partial t}\right|n;\boldsymbol{R}\right\rangle\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\varepsilon_k-\varepsilon_n)t-1\right],\quad k\neq n. \tag{3.5.9}$$

对 $k\neq n$ 的各态几率振幅都随时间振荡，并不显出长时间稳定增长的趋势. 尽管随时间进行，$\varepsilon_n(\boldsymbol{R})$和$|n;\boldsymbol{R}\rangle$都已发生了很大变化，但原位于任何一个定态的体系，现在仍然位于时间 t 的那个状态. 在历史上，Einstein 和 Ehrenfest 在量子力学诞生以前的 1911 年就设想到了这个结论，在 1928 年 M. Born 和 V. Fock 证明了它.

Hamilton 量 $H(t)$随时间缓慢演化的条件可以包含在以下的不等式中[27]：

$$\hbar\left|\frac{\left\langle n;\boldsymbol{R}\left|\frac{\partial}{\partial t}m;\boldsymbol{R}\right.\right\rangle}{\varepsilon_n(t)-\varepsilon_m(t)}\right|\ll 1,\quad n\neq m,\quad t\in[0,T],$$

此处 T 是演化的时间. K.-P. Marzlin 和 B. C. Sanders[28] 指出，对于绝热本征态变化显著的体系不慎重地使用量子绝热定理会导致不自恰. 全殿民等人[29] 指出，必须在$\left\langle n;\boldsymbol{R}\left|\frac{\partial}{\partial t}m;\boldsymbol{R}\right.\right\rangle$和$\varepsilon_n(t)-\varepsilon_m(t)$二者的时间依赖都可以忽略时，上述条件对于量子绝热定理的成立才是足够的. 否则在演化足够长的时间之后，绝热本征态的变化就会变得显著，以至于某些本征态之间的跃迁就会由动力学所驱动. 当考虑更为普遍的量子体系时，还要有附加的条件使量子绝热定理成立[9].

上面的论据说明了状态$|n;\boldsymbol{R}(0)\rangle$随时间演化，到了时间 t 仍然保持在$|n;\boldsymbol{R}(t)\rangle$. 核心的问题是：当 Hamilton 量随时间缓慢变化时波函数如何随时间演化. 举一个例子来说明思路. 磁场大小不变，但方向随时间变化时，带电粒子的自旋跟随磁场进行. 当磁场回到初始方向时，粒子的自旋是否也回到初始方向？为了回答这个问题，我们要仔细分析在磁场方向缓慢变化的情况下自旋状态如何随时间演化. 对精确的本征态$|n\rangle$，随时间演化由动力学相因子 $\exp(-\mathrm{i}\varepsilon_n t/\hbar)$ 决定. 对随时间缓慢变化的本征值 $\varepsilon_n(t)$ 这个因子可以推广为 $\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t\varepsilon_n(t')\mathrm{d}t'\right]$. 因此状态随时间演化可以写作：

$$\psi(t)=\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t\varepsilon_n(t')\mathrm{d}t'\right]|n;\boldsymbol{R}(t)\rangle, \tag{3.5.10}$$

此处$|n;\boldsymbol{R}(t)\rangle$为绝热本征态. 这就是量子绝热定理. 将这个表达式代入 Schrödinger 方程，得到

$$\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)=H(t)\psi(t)+\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t\varepsilon_n(t')\mathrm{d}t'\right]\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mid n;\,\boldsymbol{R}(t)\rangle.$$

右方第二项在绝热极限下趋于零：

$$\frac{\partial}{\partial t}\mid n;\,\boldsymbol{R}(t)\rangle=\frac{\partial\boldsymbol{R}}{\partial t}\cdot\partial_{\boldsymbol{R}}\mid n;\,\boldsymbol{R}(t)\rangle\to 0$$

当我们考虑绝热循环过程 $\boldsymbol{R}(0)=\boldsymbol{R}(T)$ 时，就要考虑到式(3.5.10)在 $t=T$ 时是否成立. M. V. Berry[13] 加了一个相因子：

$$\psi(t)=\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t\varepsilon_n(t')\mathrm{d}t'\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_n(t)}\mid n;\,\boldsymbol{R}(t)\rangle.\tag{3.5.11}$$

往往会提出问题：定义本征函数的式(3.5.3)并不定出相因子，可以在双方乘一个相因子通过重新定义本征函数而把它吸收进去. 为什么不能把式(3.5.11)中的 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_n(t)}$ 吸收到 $|n;\,\boldsymbol{R}(t)\rangle$ 中去呢？研究了 $\gamma_n(t)$ 的性质后才能真正明白这一点，从而理解 Berry 加进这个相因子是关键的一步. 相 γ_n 就被称为 Berry 相，Berry 诠释这个相是参数空间的几何性质. 将式(3.5.11)代入式(3.5.4)就得到 $\dot{\gamma}_n(t)$ 的方程：

$$\dot{\gamma}_n(t)=\mathrm{i}\left\langle n;\,\boldsymbol{R}\left|\frac{\partial}{\partial t}n;\,\boldsymbol{R}\right.\right\rangle=\mathrm{i}\,\dot{\boldsymbol{R}}(t)\cdot\left\langle n;\,\boldsymbol{R}\,\middle|\,\nabla_R n;\,\boldsymbol{R}\right\rangle.\tag{3.5.12}$$

最后等式的根据是：$|n;\,\boldsymbol{R}\rangle$ 只通过 $\boldsymbol{R}(t)$ 依赖时间. ∇_R 代表对 $\boldsymbol{R}$ 取的梯度. 正如式(3.5.8)所示，$\left\langle n;\,\boldsymbol{R}\left|\frac{\partial}{\partial t}n;\,\boldsymbol{R}\right.\right\rangle$ 是纯虚数，因而 $\dot{\gamma}_n$ 为实数，即只要 γ_n 初始值为实数，它就一直保持为实数. 它是个相角.

令

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}(t))\equiv\mathrm{i}\langle n;\,\boldsymbol{R}\,|\,\nabla_R n;\,\boldsymbol{R}\rangle,\tag{3.5.13}$$

式(3.5.12)即变为

$$\dot{\gamma}_n(t)=\dot{\boldsymbol{R}}(t)\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}).\tag{3.5.14}$$

Berry 提出问题：令 $\boldsymbol{R}(t)$ 随时间慢变化从 $\boldsymbol{R}(0)$ 变到 $\boldsymbol{R}(T)=\boldsymbol{R}(0)$，即经一周期回到初始值，是否 $\gamma_n(T)$ 也回到初始值 $\gamma_n(0)$？计算一下，有

$$\begin{aligned}\gamma_n(T)-\gamma_n(0)&=\int_0^T\mathrm{d}t\dot{\gamma}_n(t)=\int_0^T\mathrm{d}t\,\dot{\boldsymbol{R}}(t)\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})\\&=\oint_C\mathrm{d}\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}),\end{aligned}$$

此处 C 是 $\boldsymbol{R}(t)$ 从 0 到 T 回到初始值所描出的封闭路径. 用 Stokes 定理，并记沿 C 的这个封闭积分为 $\gamma_n(C)$，有

$$\gamma_n(C)=\int_S\mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\nabla_{\boldsymbol{R}}\times\boldsymbol{A}=\mathrm{i}\int_S\mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\nabla_{\boldsymbol{R}}\times\left\langle n;\,\boldsymbol{R}\,\middle|\,\nabla_{\boldsymbol{R}}n;\,\boldsymbol{R}\right\rangle,\tag{3.5.15}$$

这就是 Berry 相. S 为 C 所围出的表面. 一般情况 $\boldsymbol{A}$ 不是无旋的，因此封闭积分不为 0，即 $\gamma_n(T)\neq\gamma_n(0)$，或 $\int_{\boldsymbol{R}_1}^{\boldsymbol{R}_2}\mathrm{d}\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})$ 与路径有关. $\gamma_n(t)$ 是不可积的，它不能表示为 $\boldsymbol{R}$ 的函数. 由于 $|n;\,\boldsymbol{R}\rangle$ 只通过 $\boldsymbol{R}$ 和 t 有关，因此它不能把相因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_n(t)}$ 吸收进去. 这说明了在式(3.5.11)中包括进相因子的必要性. 因式(3.5.15)$\gamma_n(C)$ 的值不依赖 $\boldsymbol{R}$ 完成封闭路径所需的时间(只要足够长以满足绝热近似)，Berry 称之为“几何相”，这是和动力学相 $-\frac{1}{\hbar}\int_0^T\varepsilon_m(t)\mathrm{d}t$ 对照的. 从式(3.5.15)看 Aharonov-Bohm 相也属同一类几何相.

式(3.5.13)定义了一个矢量函数,符号 $\boldsymbol{A}$ 不是偶然使用的.考虑将 $|n;\boldsymbol{R}\rangle$ 的相作一改变:

$$|n;\boldsymbol{R}\rangle \to e^{i\Theta(\boldsymbol{R})}|n;\boldsymbol{R}\rangle, \tag{3.5.16}$$

则相应的改变有

$$|\nabla_R n;\boldsymbol{R}\rangle \to (i\nabla_R\Theta)e^{i\Theta(\boldsymbol{R})}|n;\boldsymbol{R}\rangle + e^{i\Theta(\boldsymbol{R})}|\nabla_R n;\boldsymbol{R}\rangle,$$

$$\boldsymbol{A} \to -\nabla_R\Theta + i\langle n;\boldsymbol{R}|\nabla_R n;\boldsymbol{R}\rangle = \boldsymbol{A} - \nabla_R\Theta. \tag{3.5.17}$$

式(3.5.16),式(3.5.17)正是一种规范变换.由于 $\gamma_n(C)$ 和 $\nabla\times\boldsymbol{A}$ 相关(见式(3.5.15)),在这一变换中它是不变量.这也是相位成为可观测量的必要条件.$\boldsymbol{A}$ 和 $\nabla\times\boldsymbol{A}$ 相应地是一种规范连络和曲率.从式(3.5.12)可知 $\langle n;\boldsymbol{R}|\nabla_R n;\boldsymbol{R}\rangle$ 也是纯虚数.式(3.5.13),式(3.5.15)给出

$$\begin{aligned}\gamma_n(C) &= i\int_S \nabla_R\times\langle n;\boldsymbol{R}|\nabla_R n;\boldsymbol{R}\rangle\cdot d\boldsymbol{S}\\ &= -\mathrm{Im}\int \nabla_R\times\langle n;\boldsymbol{R}|\nabla_R n;\boldsymbol{R}\rangle\cdot d\boldsymbol{S}\\ &= -\mathrm{Im}\int\langle\nabla_R n;\boldsymbol{R}|\times|\nabla_R n;\boldsymbol{R}\rangle\cdot d\boldsymbol{S}\\ &= -\mathrm{Im}\int\sum_{m\neq n}\langle\nabla_R n;\boldsymbol{R}|m;\boldsymbol{R}\rangle\times\langle m;\boldsymbol{R}|\nabla_R n;\boldsymbol{R}\rangle\cdot d\boldsymbol{S}.\end{aligned} \tag{3.5.18}$$

写出最后一个等式时插入了 $\sum_m |m;\boldsymbol{R}\rangle\langle m;\boldsymbol{R}| = 1$.求和只包括 $m\neq n$,是因为 $\langle n;\boldsymbol{R}|\nabla_R n;\boldsymbol{R}\rangle$ 为纯虚数,故有 $\mathrm{Im}\langle\nabla_R n;\boldsymbol{R}|n;\boldsymbol{R}\rangle\times\langle n;\boldsymbol{R}|\nabla_R n;\boldsymbol{R}\rangle=0$.

对本征方程 $h|n;\boldsymbol{R}\rangle=\varepsilon_n(\boldsymbol{R})|n;\boldsymbol{R}\rangle$ 取 ∇_R,有

$$\nabla_R h|n;\boldsymbol{R}\rangle + h|\nabla_R n;\boldsymbol{R}\rangle = \nabla_R\varepsilon_n|n;\boldsymbol{R}\rangle + \varepsilon_n|\nabla_R n;\boldsymbol{R}\rangle.$$

从左方乘以 $\langle m;\boldsymbol{R}|$ 并用本征函数的正交性($m\neq n$,非简并),得

$$\langle m;\boldsymbol{R}|\nabla_R h|n;\boldsymbol{R}\rangle + \langle m;\boldsymbol{R}|h|\nabla_R n;\boldsymbol{R}\rangle = \varepsilon_n\langle m;\boldsymbol{R}|\nabla_R n;\boldsymbol{R}\rangle,$$

即

$$\langle m;\boldsymbol{R}|\nabla_R n;\boldsymbol{R}\rangle = \frac{\langle m;\boldsymbol{R}|\nabla_R h|n;\boldsymbol{R}\rangle}{\varepsilon_n(\boldsymbol{R})-\varepsilon_m(\boldsymbol{R})}. \tag{3.5.19}$$

将式(3.5.19)代入式(3.5.18),即将 $\gamma_n(C)$ 用 ∇h 的矩阵元表示:

$$\begin{aligned}\gamma_n(C) &= -\int d\boldsymbol{S}\cdot\mathrm{Im}\sum_{m\neq n}\frac{\langle n;\boldsymbol{R}|\nabla_R h(\boldsymbol{R})|m;\boldsymbol{R}\rangle\times\langle m;\boldsymbol{R}|\nabla_R h(\boldsymbol{R})|n;\boldsymbol{R}\rangle}{[\varepsilon_m(\boldsymbol{R})-\varepsilon_n(\boldsymbol{R})]^2}\\ &\equiv -\int d\boldsymbol{S}\cdot\mathrm{Im}\boldsymbol{V}(\boldsymbol{R}).\end{aligned} \tag{3.5.20}$$

M. Berry 的贡献在于证明了在循环绝热过程中不可积相因子的存在,并提示了它的几何意义.考虑 Berry 给出的二能级系统的例子,它的 Hamilton 量是 2×2 矩阵:

$$\boldsymbol{h} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} R_3 & R_1 - iR_2\\ R_1 + iR_2 & -R_3\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{R}.$$

Hamilton 量对角化后给出本征值

$$E_+(\boldsymbol{R}) = -E_-(\boldsymbol{R}) = \frac{1}{2}(R_1^2+R_2^2+R_3^2)^{1/2} = \frac{1}{2}R.$$

容易看出在 $R=0$ 出现偶然简并,$E_+(0)=E_-(0)=0$.从 $\boldsymbol{h}$ 的表达式得出 $\nabla\boldsymbol{h}=\boldsymbol{\sigma}/2$,$\boldsymbol{V}(\boldsymbol{R})=\boldsymbol{R}/2R^3$.在此情况下,$\boldsymbol{V}$ 是在偶然简并发生时参数空间 $R=0$ 处的一个磁单极所产生的磁场.

γ_C 就是参数空间中 $\boldsymbol{R}$ 的循环变化一周期描出的封闭曲线所围面积上通过的磁通量，它正比于封闭曲线在 $R=0$ 处所张的立体角. 最后考虑 Berry 的观点对 Born-Oppenheimer 近似的修正. 现在不再对慢变量 $\boldsymbol{R}$ 规定既定的变化 $\boldsymbol{R}(t)$，而将它作为力学量处理，总体系的波函数是

$$\Psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{R}) \mid n;\ \boldsymbol{R}\rangle. \tag{3.5.21}$$

将它代入

$$H\Psi = \left[\frac{\boldsymbol{P}}{2M} + \frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})\right]\Psi = E\Psi, \tag{3.5.22}$$

并用式(3.5.3)

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})\right] \mid n;\ \boldsymbol{R}\rangle = \varepsilon_n(\boldsymbol{R}) \mid n;\ \boldsymbol{R}\rangle,$$

即得到

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\psi(\boldsymbol{R}) \mid n;\ \boldsymbol{R}\rangle + \psi(\boldsymbol{R})\varepsilon_n(\boldsymbol{R}) \mid n;\ \boldsymbol{R}\rangle = E\psi(\boldsymbol{R}) \mid n;\ \boldsymbol{R}\rangle. \tag{3.5.23}$$

将第一项算出，整式用 $\langle n;\ \boldsymbol{R}|$ 左乘，得

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\Psi(\boldsymbol{R}) - \frac{\hbar^2}{2M}2\langle n;\ \boldsymbol{R} \mid \nabla_R n;\ \boldsymbol{R}\rangle \cdot \nabla_R\psi(\boldsymbol{R}) - \frac{\hbar^2}{2M}\psi(\boldsymbol{R})\langle n;\ \boldsymbol{R} \mid \nabla_R^2 n;\ \boldsymbol{R}\rangle$$
$$+ \varepsilon_n(\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{R}) = E\psi(\boldsymbol{R}).$$

再用 $\frac{1}{2M}(\boldsymbol{P}-\hbar\boldsymbol{A})^2$ 的具体形式，上式可以写作如下形式：

$$\left[\frac{1}{2M}(\boldsymbol{P}-\hbar\boldsymbol{A})^2 + \mathcal{V}(\boldsymbol{R})\right]\psi(\boldsymbol{R}) = E\psi(\boldsymbol{R}), \tag{3.5.24}$$

其中

$$\mathcal{V}(\boldsymbol{R}) = \varepsilon_n(\boldsymbol{R}) + \frac{\hbar^2}{2M}(\langle\nabla_R n;\ \boldsymbol{R} \mid \nabla_R n;\ \boldsymbol{R}\rangle - \boldsymbol{A}^2). \tag{3.5.25}$$

式(3.5.24)是慢变量波函数的 Schrödinger 能量本征方程. 为慢变量运动提供有效势能 $v(\boldsymbol{R})$ 的主要是快运动的能量本征值 $\varepsilon_n(\boldsymbol{R})$，$\frac{\hbar^2}{2M}$ 项是修正项. 和过去教科书中推导的结果不同处是 $\boldsymbol{A}$ 的存在[①]. 如把 γ_n"吸收"到本征函数 $|n;\ \boldsymbol{R}\rangle$ 内使它在任何时间 t 都能为实数，$\boldsymbol{A}$ 就为 0. 但上面已经分析过，在一般情况下这是不可能的.

容易验证 $\mathcal{V}(\boldsymbol{R})$ 即式(3.5.25)在式(3.5.16)，式(3.5.17)所示变换下是不变的. 因此只要要求 $\psi(\boldsymbol{R})\to e^{-i\theta}\psi(\boldsymbol{R})$ 就能使方程(3.5.24)不变. $\psi(\boldsymbol{R})$ 的这个相变换和 $|n;\ \boldsymbol{R}\rangle$ 的相变换(式(3.5.16))的相角正好反号. 它们使体系总波函数 $\Psi=\psi(\boldsymbol{R})|n;\ \boldsymbol{R}\rangle$ 在变换中不变.

如果本征态有简并，则相应同一个 ε_n 还有以 a，b，…标出的若干状态. 其结果是连络以矩阵元形式出现：

$$\boldsymbol{A}_{ab} = i\langle n,a;\ \boldsymbol{R} \mid \nabla n,b;\ \boldsymbol{R}\rangle, \tag{3.5.26}$$

其相应的场强则是

$$\boldsymbol{B}_{ab} = \nabla\times\boldsymbol{A}_{ab} + i(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A})_{ab}, \tag{3.5.27}$$

和非 Abel 规范场相对应[14,15,16].

---

① 最早指出在 Born-Oppenheimer 近似中电子波函数非完整性可以用在有效核 Hamilton 量中包括规范势描述的，是 C. A. Mead 和 D. G. Truhlar(J. Chem Phys. 1979, 70: 2284).

Aharonov-Bohm 相出现之后 25 年，Berry 相的出现情况有一些类似. Berry 相在物理学各个分支中的体现已经有很多的报道.

自从 Berry 提出几何相以来，在物理学的许多领域都发现了它的存在，并进行了大量的研究工作. 有趣的是：早在 1956 年 S. Pancharatnam 在光的偏振研究方面，1963 年和 1976 年 G. Herzberg，H. C. Longuet-Higgins 在分子结构研究方面，1979 年 C. A. Mead 和 D. E. Truhlar 在 Born-Oppenheimer 近似研究方面都有过存在几何相的结论. A. Shapere 和 F. Wilczek 主编的"Geometric Phases in Physics"[17]一束包含评述性的章节以及关于在物理学各分支中几何相的研究文献.

当循环过程并不很慢时，可以对绝热近似作高阶修正[18].

3.6　Aharonov-Anandan 相

1987 年 Aharonov 和 Anandan[19]研究了循环演化一般条件下量子力学态的几何相. 一个物理体系的状态随时间变化，在一段演化时间 τ 后回到原来的状态，称为循环演化. 在量子力学中循环演化的始末态矢量之间的关系是

$$|\psi(\tau)\rangle = e^{i\phi}|\psi(0)\rangle, \tag{3.6.1}$$

相因子 $e^{i\phi}$可以有可观测效应. 在 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 中，$\psi(\tau)$ 与 $\psi(0)$ 在 $\phi\neq 0$ 时并不是同一矢量，故态矢的循环演化在 $\mathscr{H}$ 中描出的路径 C 并不是封闭的. $\mathscr{H}$ 的投影 Hilbert 空间 $\mathscr{P}$ 不区分 $|\psi\rangle$ 与 $e^{if}|\psi\rangle$（f 为实数），因此 $|\psi(\tau)\rangle$ 与 $|\psi(0)\rangle$ 在 $\mathscr{P}$ 中是同一个矢量，而循环演化在 $\mathscr{P}$ 中所描述的路径 $\hat{C}$ 是封闭的. 用 $\mathscr{P}$ 描述循环演化是更方便的. 设 $|\psi\rangle\in\mathscr{H}$ 在 Hamilton 量 $H(t)$ 驱动之下按 Schrödinger 方程演化：

$$H(t)|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle, \tag{3.6.2}$$

并在时间 τ 完成一个循环. $|\psi(t)\rangle$ 与 $|\psi(0)\rangle$ 关系由式(3.6.1)给出. 定义

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{-if(t)}|\psi(t)\rangle, \tag{3.6.3}$$

因此有

$$\begin{aligned}|\tilde{\psi}(\tau)\rangle &= e^{-if(\tau)}|\psi(\tau)\rangle = e^{-i[f(\tau)-\phi]}|\psi(0)\rangle \\ &= e^{-i[f(\tau)-f(0)-\phi]}|\tilde{\psi}(0)\rangle.\end{aligned} \tag{3.6.4}$$

如要求

$$f(\tau)-f(0)=\phi \tag{3.6.5}$$

就有

$$|\tilde{\psi}(\tau)\rangle = |\tilde{\psi}(0)\rangle. \tag{3.6.6}$$

$|\tilde{\psi}(t)\rangle$ 就是 $\mathscr{P}$ 中的矢量，它在一个循环中描绘出一个封闭曲线. 将式(3.6.3)代入式(3.6.2)就能求出 $f(t)$ 所满足的方程：

$$H|\psi\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}e^{if}|\tilde{\psi}\rangle = -\hbar\frac{df}{dt}e^{if}|\tilde{\psi}\rangle + i\hbar e^{if}\frac{d}{dt}|\tilde{\psi}\rangle.$$

左乘以 $\frac{1}{\hbar}\langle\psi| = \frac{1}{\hbar}e^{-if}\langle\tilde{\psi}|$ 并移项，得①

---

① 和绝热情况 $\phi_d = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E(t')dt'$ 相比，$E(t)$ 是绝热能量. 在一般情况下将 $E(t')$ 置换为 $\langle\psi(t')|H|\psi(t')\rangle$.

$$-\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\hbar}\langle\psi\mid H\mid\psi\rangle-\langle\tilde{\psi}\mid \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mid\tilde{\psi}\rangle, \tag{3.6.7}$$

$$\phi=f(\tau)-f(0)=-\frac{1}{\hbar}\int_0^\tau\langle\psi\mid H\mid\psi\rangle\mathrm{d}t+\int_0^\tau\langle\tilde{\psi}\mid \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mid\tilde{\psi}\rangle\mathrm{d}t. \tag{3.6.8}$$

在定 Berry 相时需把动力学相去掉. 对定态，动力学相是 $-\frac{1}{\hbar}Et$，对绝热定态，它是 $-\frac{1}{\hbar}\int_0^t E(t')\mathrm{d}t'$. 现在考虑的是一般情况，动力学相是

$$\phi_{\mathrm{d}}(t)=-\frac{1}{\hbar}\int_0^t\langle\psi(t')\mid H\mid\psi(t')\rangle\mathrm{d}t'. \tag{3.6.9}$$

式(3.6.8)右方的第一项正是 $\phi_{\mathrm{d}}(\tau)$，因此第二项就是循环演化的几何相 β，有

$$\beta=\int_0^\tau\langle\tilde{\psi}\mid \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mid\tilde{\psi}\rangle\mathrm{d}t \tag{3.6.10}$$

这个几何相是普适的，意思是对于投影到 $\mathscr{P}$ 中一个封闭路径 $\hat{C}$ 的无穷多的 $\mathscr{H}$ 中的循环演化路径 C，相应无穷多的 $H(t)$，它们驱动状态沿着 C 演化，几何相式(2.80)是唯一的. 它被称为 Aharonov-Anandan 相.

3.7 Berry 相的实验显现

Berry 相的出现分两类情况. 一类是参数 $\boldsymbol{R}$ 能在实验中控制，这种情况可以通过不同相的状态间的干涉测出 Berry 相；另一类情况是，$\boldsymbol{R}$ 是更大体系的力学量，例如在分子结构的 Born-Oppenheimer 近似中，就需要将实测的本征值与(3.5.24)，(3.5.25)式的理论结果相比较，反过来对 Berry 相的存在作出判断. 以下我们只讨论第一种情况.

Berry[13] 分析了粒子自旋慢变化一个循环后出现的几何相. 自旋为 S 的粒子与慢变化的磁场 $\boldsymbol{B}$ 相互作用，Hamilton 量是

$$h(\boldsymbol{B})=\kappa\hbar\boldsymbol{B}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}, \tag{3.7.1}$$

κ 是与回转磁比值有关的常数，$\hat{\boldsymbol{S}}$ 是自旋算符. 能量本征值是

$$E_n(\boldsymbol{B})=\kappa\hbar Bn, \tag{3.7.2}$$

n 是自旋在 $\boldsymbol{B}$ 方向的投影，取值自 $-S$ 到 S，$-S\leqslant n\leqslant S$. 式(3.5.18)给出 Berry 相

$$\gamma_n(C)=-\int\mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{V}_n, \tag{3.7.3}$$

其中 $\boldsymbol{V}_n$ 是

$$\boldsymbol{V}_n=\mathrm{Im}\frac{1}{B^2}\sum_{m\neq n}\frac{\langle n;\boldsymbol{B}\mid\hat{\boldsymbol{S}}\mid m;\boldsymbol{B}\rangle\times\langle m;\boldsymbol{B}\mid\hat{\boldsymbol{S}}\mid n;\boldsymbol{B}\rangle}{(m-n)^2} \tag{3.7.4}$$

为了计算上式的矩阵元，将 B 的方向定为 z 轴，并用

$$\begin{aligned}(\hat{S}_x\pm\mathrm{i}\hat{S}_y)\mid n\rangle&=[s(s+1)-n(n\pm1)]^{\frac{1}{2}}\mid n\pm1\rangle,\\ \hat{S}_n\mid n\rangle&=n\mid n\rangle.\end{aligned} \tag{3.7.5}$$

在计算 V_{nx} 和 V_{ny} 时，因矢量积都涉及 $\hat{S}_z$ 的矩阵元，而 $\hat{S}_z$ 的非对角矩阵元($m\neq n$)为 0，因此 $V_{nx}=V_{ny}=0$. 计算 V_{nz} 时，只有 $m=n\pm1$ 才有贡献. 因此有

$$V_{nz}(\boldsymbol{B}) = \mathrm{Im}\,\frac{1}{B^2}[\langle n \mid \hat{S}_x \mid n+1\rangle\langle n+1 \mid \hat{S}_y \mid n\rangle - \langle n \mid \hat{S}_y \mid n+1\rangle\langle n+1 \mid \hat{S}_x \mid n\rangle$$
$$+ \langle n \mid \hat{S}_x \mid n-1\rangle\langle n-1 \mid \hat{S}_y \mid n\rangle - \langle n \mid \hat{S}_y \mid n-1\rangle\langle n-1 \mid \hat{S}_x \mid n\rangle] = \frac{n}{B^2}. \tag{3.7.6}$$

在一般坐标轴取向情况下，有

$$\boldsymbol{V}_n(\boldsymbol{B}) = n\frac{\boldsymbol{B}}{B^3}. \tag{3.7.7}$$

因此

$$\gamma_n(C) = -\int \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{V}_n = -n\Omega(C), \tag{3.7.8}$$

在 $\boldsymbol{B}(B_x, B_y, B_z)$ 参数空间中 $\int \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{B}}{B^3}$ 正是 $\boldsymbol{B}$ 描述一个封闭曲线 C 在空间原点处所张的立体角 $\Omega(C)$. Berry 相因子是 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_n(C)} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\Omega(C)}$. 这是自旋跟着磁场（通过磁矩与磁场相互作用）慢变化一周期产生的几何相，且它和 n 成正比. 在实验上如能制备粒子作为两个不同 n 值的叠加态，则两部分的 Berry 相不同，发生干涉就能使 Berry 相显现.

3.7.1 光子 Berry 相的量子干涉现象

乔瑞宇和吴泳时[20]建议采用绕成螺旋形的光纤（图 3.17）. 光沿光纤传播，其波矢 $\boldsymbol{k}$ 连续变化. 当光纤方向再次回到初始值时，$\boldsymbol{k}(k_x, k_y, k_z)$ 空间中的代表矢量在球面上描出一个圆. 如这个圆在原点处张成一个圆锥，半顶角为 θ，则它所张的立体角是

$$\Omega(C) = 2\pi(1-\cos\theta). \tag{3.7.9}$$

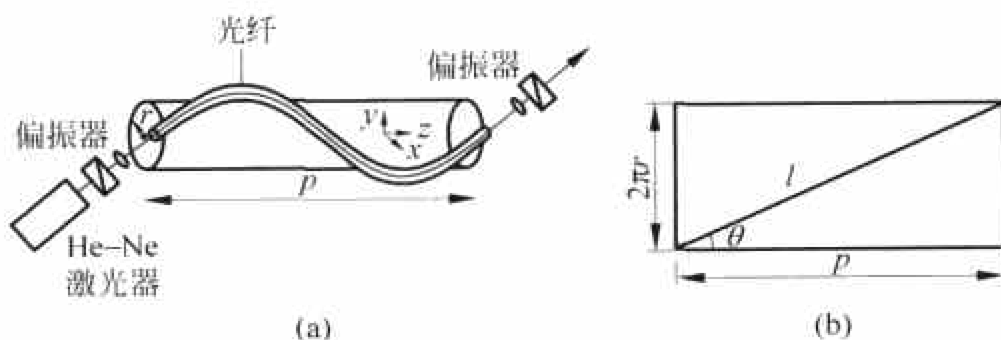


图 3.17 光在螺旋光纤中的 Berry 相

(a) 螺旋光纤实验示意图；(b) 打开圆柱面上的光纤路径

由于光子没有质量，保证了自旋沿 $\boldsymbol{k}$ 方向 s_k 只能为 $+1$ 或 -1. 由于自旋跟随 $\boldsymbol{k}$ 慢变化，完成一循环时 Berry 相是

$$\gamma(C) = -2\pi s_k(1-\cos\theta). \tag{3.7.10}$$

富田（A. Tomita）和乔瑞宇在此基础上进行了实验[21]. 如图 3.17(a)所示，He-Ne 激光经线偏振器进入光纤，线偏振是 $s_k=+1$ 与 $s_k=-1$ 的等量叠加. 通过光纤后 $\boldsymbol{k}$ 恢复最初方向，两种偏振间由于 Berry 相符号相反有了相差，致使合成的线偏振方向有了改变. 均匀缠绕的螺旋线在打开了的圆柱面上如图 3.17(b)中斜线所示. 光纤长是 l，圆柱长是 p，θ 是光纤方向与螺旋轴（圆柱轴）方向间的夹角，称为顶角（apex angle），有

$$\cos\theta = \frac{p}{l}. \tag{3.7.11}$$

因此

$$\gamma(C) = -2\pi s_k\left(1 - \frac{p}{l}\right). \tag{3.7.12}$$

在实验中也采取了不同绕制光纤的几何条件. 实验结果示于图 3.18. 线偏振的旋转角与立体角成线性关系，和理论值符号很好. 曲线上的不同形状的点代表不同绕制的几何条件，即均匀和不同程度非均匀绕制，是为了验证是否在参数空间中封闭路径连续扭曲时 $\gamma(C)$ 始终与 $\Omega(C)$ 成正比. 这是对 Berry 相的第一个实验验证.

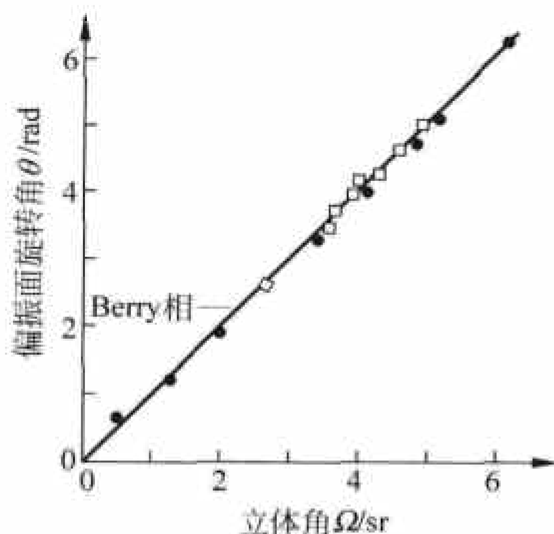


图 3.18　偏振旋转角与立体角 $\Omega(C)$ 关系

采用光子进行实验是很巧妙的. 由于光子是 Bose 子，因此对于个别光子的实验可以通过大量光子流来实现. 光子自旋跟随动量循环出现几何相的现象可以用经典物理的观点解释. 偏振方向的旋转相当于在传播方向慢变化时光波电矢量的平行输运产生的角度非完整. 这只要用 Maxwell 方程就能得到[22]. 因此，这个现象可以理解为一个能在过渡到经典情况($\hbar \to 0$)仍能存在的量子现象.

3.7.2　螺旋磁场中中子自旋旋转的 Berry 相实验

T. Bitter 和 D. Dubbers[28] 进行了中子自旋慢旋转产生 Berry 相的测量. 如何使中子能处于一个慢旋转的磁场中呢？办法是让中子通过一个在空间按螺旋变化的磁场，这时中子所看见的就是随时间旋转的磁场. 中子通过其磁矩与磁场的耦合使其自旋跟上慢变化，完成一个循环后就产生 Berry 相. 图 3.19(a) 给出磁场矢量 $\boldsymbol{B}$ 沿封闭曲线 C 的绝热输运. 图 3.19(b) 给出产生在 xy 平面旋转的磁场分量 $\boldsymbol{B}_1$ 的螺旋线圈，另有线圈产生 B_z. 令中子在 $t=0$ 处于状态 $|m\rangle$，m 为自旋 z 分量. 令 T 代表 $\boldsymbol{B}_1$ 转一周的时间（中子通过 $\boldsymbol{B}_1$ 在空间转一周的距离所需的时间）. 在此时间内中子的动力学相是

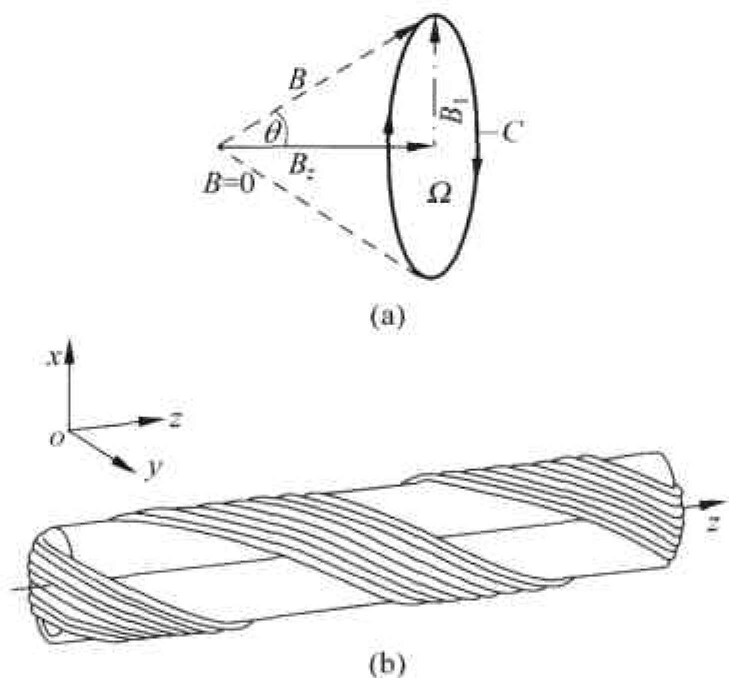


图 3.19　磁场矢量 $\boldsymbol{B}$ 沿封闭曲线 C 的输运
(a) 原理图；(b) 产生 $\boldsymbol{B}_1$ 的螺旋线圈

$$\phi_d = \kappa\int_0^T B(t)\,\mathrm{d}t = \kappa BT.$$

根据式(3.7.8) Berry 相位是 $-2\pi(1-\cos\theta)$，故总相位 Φ_T 是①

① 参考文献[23]、[24]在定义相角时把 m 作因子提出，在 3.7.2 节中均依此定义.

$$\Phi_T = \kappa BT - 2\pi(1-\cos\theta), \tag{3.7.13}$$

右方两项分别为动力学相和 Berry 相. 实验是用 Grenoble 的 Laue-Langevin 研究所反应堆提供的中子(可以得到极化束)进行的. 令 $P_\alpha(0)$ 和 $P_\beta(T)$ 代表中子在 $t=0$ 和 T 时间的极化分量, $\alpha,\beta=x,y,z$. 实验测出的始末态极化,用

$$P_\beta(T) = G_{\beta\alpha}P_\alpha(0)$$

定出系数 $G_{\beta\alpha}$ 并和 Dubbers 的理论结果比较[28].

在 $B_z=0$(此时 $\theta=\pi/2,\gamma=-2\pi$)时测出的 G_{yy} 示于图 3.20(a), 从数据得出的 Φ_T 和理论的比较示于图 3.20(b). 定出的 γ 值为 2π, 在 $B_z\neq0$ 时定出的 Berry 相 γ 和立体角 Ω 的比较示于图 3.20(c).

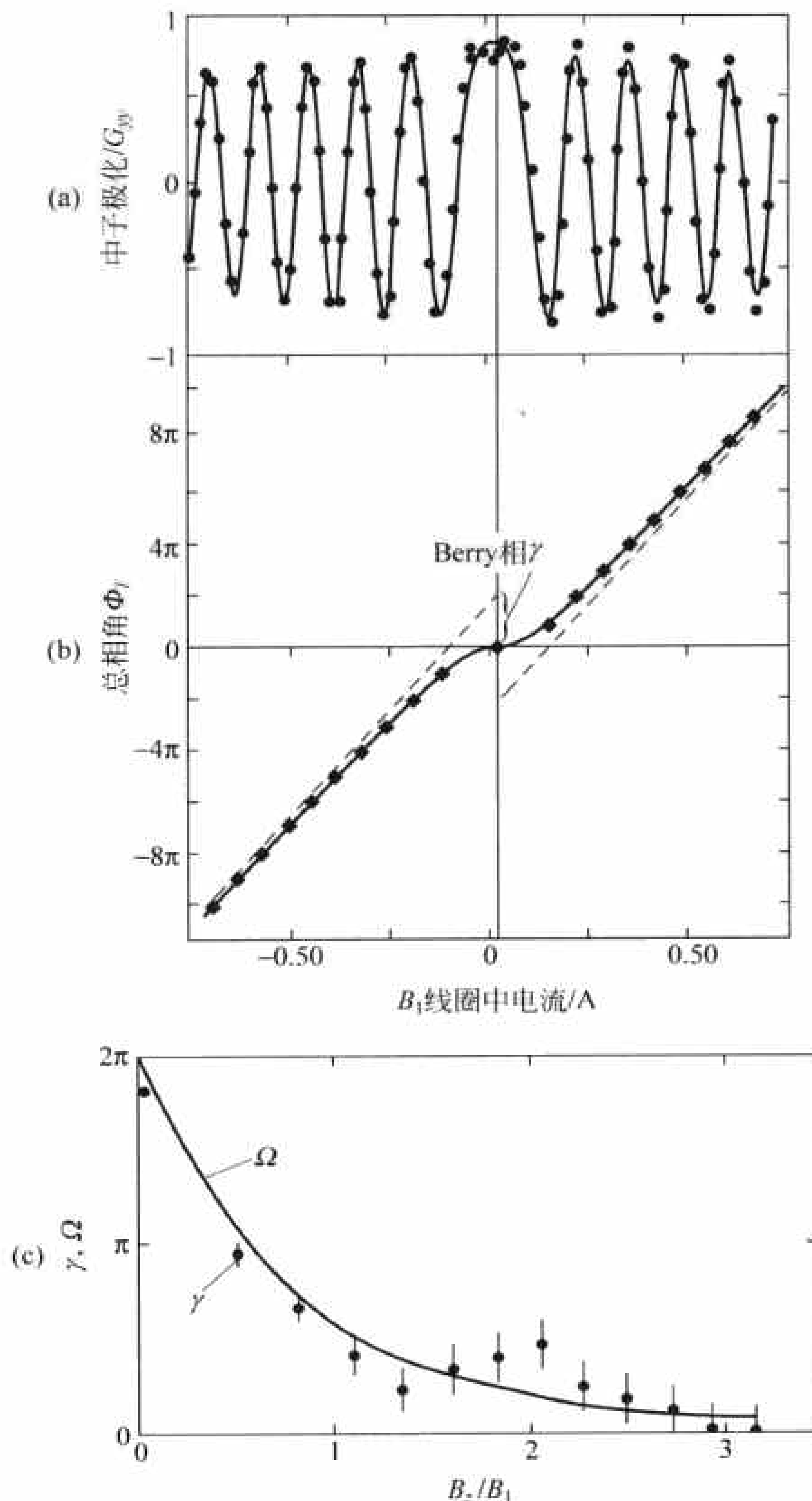


图 3.20 横向自旋在螺旋场 $\boldsymbol{B}_1$ 中的旋转

(a) 中子极化; (b) 总相角和 Berry 相; (c) Berry 相 γ 的理论(曲线)与实验(点)的比较

D. J. Richardson, A. I. Kilvington, K. Green 和 S. K. Lamoreaux[24]所进行的正好是一个"互补"的实验. 用 Laue-Langevin 研究所反应堆的极化超冷中子在旋转磁场中进行实验. 超冷中子是速度≲5m/s 的中子, 对它们可以用"瓶子"来装. 因为 Be 或 BeO 表面的 Fermi 势很高, 几乎以任何角度入射到表面的超冷中子都会被反射. 只要表面足够纯, 储藏时间就是中子衰变寿命量级. 他们验证了 Berry 相与参数空间($\boldsymbol{B}$)立体角关系, 此外, 还验证了多次循环的 Berry 相的相加性.

3.7.3 自旋绝热旋转造成的核四极共振频率分裂

R. Tycho[25]报道了一项核自旋的绝热旋转造成的核四极共振频率分裂研究, 验证了 Berry 相. 他选了 $NaClO_3$ 单晶, ^{35}Cl 核自旋为 $s=3/2$. 自旋以晶体对称轴(记为 z')取向. 这是四极耦合, Hamilton 量是

$$h = \omega_Q S_{z'}^2 \tag{3.7.14}$$

式中 ω_Q 是表征耦合的参量. 用射频脉冲激发, ^{35}Cl 核即处于不同 S_z 态的叠加态上. 用在 z 轴方向绕制的螺线管线圈探测衰变信号得到核四极共振谱. 不同 $|S_z|$ 值给出两个能级, 共振只有一条谱线(约 29.94MHz). 如图 3.21 所示, 使晶体对称轴 z' 与 z 轴成 θ 角, 并将晶体沿 z 轴以角频率 ω_R 慢速旋转($\omega_R \ll \omega_Q$), $S_{z'}$ 随时间的变化是

$$S_{z'}(t) = S_z\cos\theta + S_x\sin\theta\cos\omega_R t + S_y\sin\theta\sin\omega_R t, \tag{3.7.15}$$

$$H(t) = \omega_Q S_{z'}^2(t). \tag{3.7.16}$$

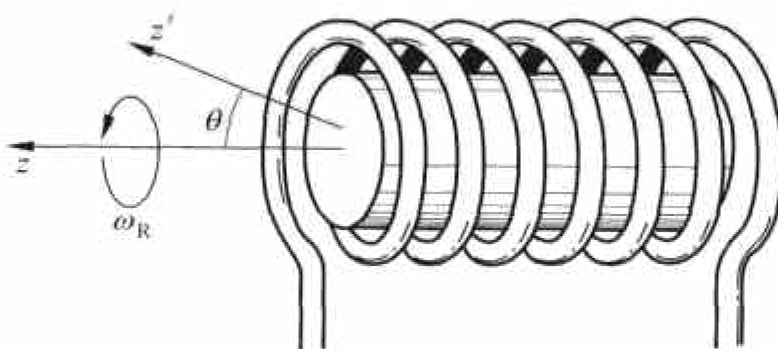


图 3.21 自旋绝热旋转导致核四极共振劈裂实验示意图

用 $S_{z'}$ 本征态表示的与时间有关的一组基是:

$$\begin{aligned}
|a\rangle &= \left|\frac{3}{2}\right\rangle \\
|b\rangle &= \cos\frac{\xi}{2}\left|\frac{1}{2}\right\rangle - \sin\frac{\xi}{2}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle \\
|c\rangle &= \sin\frac{\xi}{2}\left|\frac{1}{2}\right\rangle + \cos\frac{\xi}{2}\left|-\frac{1}{2}\right\rangle \\
|d\rangle &= \left|-\frac{3}{2}\right\rangle,
\end{aligned} \tag{3.7.17}$$

此处

$$\tan\xi = 2\tan\theta.$$

考虑到算符 $S_{z'}$ 和它的某些本征态与 θ 有关, Berry 相写作

$$\beta = 2\pi\int_0^\theta d\theta'\sin\theta'\langle\psi \mid S_{z'} \mid \psi\rangle. \tag{3.7.18}$$

对式(3.7.17)各态,相应的 Berry 相是

$$\begin{aligned} \beta_a &= 3\pi(\cos\theta - 1) \\ \beta_b &= -\pi[(4 - 3\cos^2\theta)^{1/2} - 1)] \\ \beta_c &= \pi[(4 - 3\cos^2\theta)^{1/2} - 1)] \\ \beta_d &= -3\pi(\cos\theta - 1) \end{aligned} \tag{3.7.19}$$

实验在 $\cos^2\theta=1/3$ 条件下进行.这样可能的相差就是 $-2\sqrt{3}\pi, 0, 2\sqrt{3}\pi(\mathrm{mod}2\pi)$.考虑两个本征态 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$,在 $t=0$ 时由射频脉冲产生.在时间 $T=2\pi/\omega_R$ 后,两个态间相对 Berry 相差是 $\gamma_1-\gamma_2$.但这个相差是随时间连续积累的,随时间的相差就相当于频移

$$\Delta\omega = \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2\pi}\omega_R. \tag{3.7.20}$$

这样在原来一条共振谱线的基础上就分裂成三条,$\Delta\omega$ 分别为 $-\sqrt{3}\omega_R, 0, \sqrt{3}\omega_R$.实验结果证实了这个分析.图 3.22(a)是谱线随 ω_R 的变化,谱线的总体移动是因样品温度变化造成的.图 3.22(b)是两条边线频差随 ω_R 的变化,直线的斜率正是 $2\sqrt{3}$.

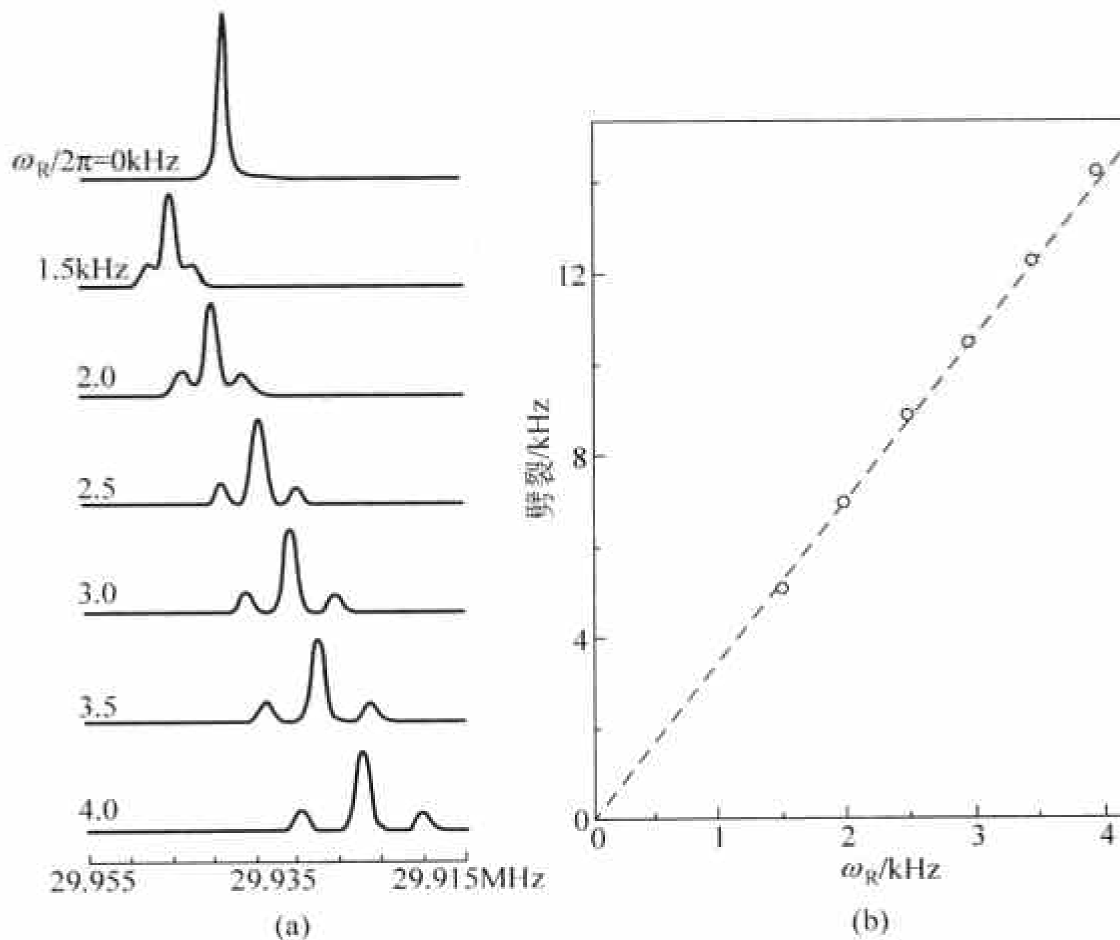


图 3.22 ^{35}Cl 核四极共振劈裂

(a) ^{35}Cl 核四极共振谱随 ω_R 的变化;(b) 两条边线频差劈裂与 ω_R 的关系

参考文献

[1] Peshkin M, Tonomura A. The Aharonov-Bohm Effects. Berlin: Springer Verlag, 1989.

[2] Aharonnov Y, Bohm D. Phys Rev, 1959, 115: 485.

[3] Wu T T, Yang C N. Phys Rev, 1975, D 12: 3845.

[4] Feynman R P, Leighton R B, Sands M. The Feynman Lectures on Physics. vol. 2. Reading: Addison-Wesley, 1964, 15-12.

[5] Byers N, Yang C N. Phys Rev, Lett. 1961, 7: 46.
[6] Chambers R G. Phys Rev Lett, 1960, 5: 3.
[7] Mollenstedt G, Bayh W. Phys B, 1962, 18: 299; Naturwissen., 1962, 4: 81; Bayh W Z. Phys, 1962, 169: 492.
[8] Tonomura A. Rev. Mod. Phys., 1987, 59: 639.
[9] Tonomura A, Osakabe N, Matsuda T, Kawasaki T, Endo J, Yano S, Yamada H. Phys Rev Lett, 1986, 56: 792; Tonomura A, Matsuda T, Endo J, Todokoro H, Komoda T. J Electron Microsc, 1979, 28: 1.
[10] Aharonov Y, Casher A. Phys. Rev. Lett., 1984, 53: 319.
[11] Cimmino A, Opat G I, Klein A G, Kaiser H, Werner S A, Arif M, Clothier R. Phys Rev Lett, 1989, 63: 380.
[12] Berry M V. Phys Today, 1990, 43(12): 34.
[13] Berry M V. Proc Roy Soc London, 1984, A392: 45.
[14] Wilczek F, Zee A. Phys Rev Lett, 1984, 52: 2111.
[15] Moody J, Shapere A, Wilczek F. Phys Rev Lett, 1986, 56: 893.
[16] Jackiw R. Phys Rev Lett, 1986, 56: 2779.
[17] Shapere A, Wilczek W. Geometric Phases in Physics. Singapore: World Scientific, 1989.
[18] Sun C P. J Phys, 1988, A21: 1595.
[19] Aharonov Y, Anandan J S. Phys Rev Lett, 1987, 58: 1593.
[20] Chiao R Y, Wu Y S. Phys Rev Lett, 1986, 57: 933.
[21] Tomita A, Chiao R Y. Phys Rev Lett, 1986, 57: 937.
[22] Berry M V. Nature, 1987, 326: 277.
[23] Bitter T, Dubbers D. Phys Rev Lett, 1987, 59: 251.
[24] Muskat E, Dubbers D, Scharpf O. Phys Rev Lett, 1987, 58: 2047.
[25] Richardson D J, Kilvington A I, Green K, Lamoreaux S K. Phys Rev Lett, 1988, 61: 2030.
[26] Tycho R. Phys Rev Lett, 1987, 58: 2281.
[27] Schiff L. *Quantum Mechanics*. 3rd edition. New York: McGraw-Hill Inc, 1968.
[28] Marzlin K-P, Sanders B C. Phys Rev Lett, 2004, 93: 160408.
[29] Tong D M, Singh K, Kwek L C, Oh C H. Phys Rev Lett, 2005, 95: 110407.

第4章 量子力学与经典力学的界限，缠绕与退相干

在量子力学教程中，我们了解到量子力学是从原子和分子开始的微观世界的理论. 作为更精确和更普遍的理论，它也应对宏观世界适用，而经典力学只是量子力学在涉及的作用量比$\hbar$大得多时的极限情况. 从1925年量子力学初创时开始，如何能演示一下以上的叙述一直是热烈讨论和争议的问题，更不用说去严格证明了.

从一个简单的问题说起. 量子力学中谐振子本征态和经典振子的行为极度不同. 量子力学谐振子是否具有和经典振子相似的状态呢？在1926年Schrödinger从本征态构成了一个模拟经典振子往复运动的波包. 由于这个成功的鼓舞，他致力于从氢原子本征态构成一个模拟Kepler运动的波包. 因为谐振子能量状态是等间距的，因而波包不扩散，而氢原子的却不是，他并没有取得成功. 考虑到氢原子能级在量子数n愈来愈大时也愈来愈趋近等间距情况，在20世纪70年代中期构成了高激发态的氢原子圆轨道波包. 它确实模拟Kepler圆轨道运动，但作为一个量子力学的客体，这个波包要变宽并扩散. 为了形成椭圆轨道波包，需要找出相应能表征轨道形状的经典Runge-Lenz矢量的量子力学守恒量. 在80年代末期完成了这个任务，构成了高激发的椭圆轨道波包. 以上的讨论是4.1，4.2，4.4节的内容.

能不经过解Schrödinger方程就解出量子力学能量本征态问题吗？答案是肯定的，只要问题的动力学对称能确切知道. 对氢原子，这个对称是$SO(4)$. 在一些局限条件下可以用角动量算符和量子力学Runge-Lenz算符构成这个群的生成元. 这样氢原子的束缚态能谱除一个乘数因子外就完全确定了. 这是4.3节的内容.

在量子力学中线性叠加原理起着极为重要的作用. 对微观世界，它的推论是非常正确的. 但对日常的经典现实，这个原理能给出荒谬的结论. 它允许在日常生活中永不能共存的状态叠加，例如一只活猫和它自己的尸体叠加. 它们不仅能同时存在，还要能相互干涉. 这就是有名的Schrödinger猫. 当叠加的各项代表宏观状态时，必须存在某种机制能淬灭各项之间的干涉，亦即使它们不再相干. 这时就有状态的各种结局以相应的几率出现，在经典意义上是完全可以接受的. 几十年来退相干的机制始终是集中研究和争论的课题，物理学家用模型演示这种机制，逐渐取得共识的是退相干的根源是环境的影响. 在4.5～4.8节介绍退相干机制和一个动力学退相干模型，以及如何到达量子力学的经典极限. 最后在4.9节中讨论在实验室中实现的Schrödinger猫，即将两个宏观可区别的状态相干地叠加起来，即宏观缠绕态.

从量子力学诞生起，它和经典力学的关系一直是热门研究的课题. 早期的理解是，经典

力学适用于宏观客体,粒子运动遵循确定的轨道.量子力学适用于微观客体,其规律是概率性的.但作为物理学的基本规律,量子力学也应适用于宏观客体.在这种情况下它应给出经典力学的规律作为它的极限情况.超流与超导的发现告诉人们某些宏观体系是服从量子力学规律的,这将在第 6 章中讨论.至于量子力学如何在极限情况下归结为经典力学,多年的研究已有不少成果,近 10 年来又有新的发展.

量子力学中力学量的平均值随时间的变化给出,在一维势 $V(x)$ 中的质量为 m 的粒子,其波函数为 ψ[①],则其坐标的期待值 $\langle x\rangle = \int \psi^* x\psi \mathrm{d}x$ 满足下式:

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle x\rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle,$$

这就是 Ehrenfest 定理.在形式上它和经典运动方程类似.但量子力学中坐标期待值的运动和由 $-\partial V/\partial x$ 所决定的经典粒子运动只能在一定条件下才有相似之处.和经典粒子相似的是量子力学中的波包,它的波函数 $\psi(x)$ 只在 $\bar{x}=\langle x\rangle$ 附近的小区域内才显著地不为 0,$\bar{x}$ 是波包中心的坐标.即使如此,$\bar{x}$ 的运动是否由经典方程

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\bar{x} = -\frac{\partial V(\bar{x})}{\partial \bar{x}}$$

给出? 即是否有 $\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle\Big|_{\bar{x}} = \frac{\partial V(\bar{x})}{\partial \bar{x}}$? 在一般情况下,双方是不相等的,设 $V(x)$ 是缓变函数,将 $\frac{\partial V}{\partial x}$ 在 $\bar{x}$ 附近展开,准确到 $\langle (x-\bar{x})^2\rangle \equiv \langle \Delta x^2\rangle$ 项:

$$\frac{\partial V}{\partial x} = \frac{\partial V(\bar{x})}{\partial \bar{x}} + \frac{1}{2}\frac{\partial^3 V(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3}\langle \Delta x^2\rangle.$$

因此,只有在

$$\left|\frac{\partial V(\bar{x})}{\partial \bar{x}}\right| \gg \frac{1}{2}\left|\frac{\partial^3 V(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3}\right|\langle \Delta x^2\rangle$$

时波包中心的运动才近似相当于经典粒子.但一般情况下波包总是要弥散的.即使开始时上式成立,随着时间的流逝上式总会失效,波包中心的运动会愈来愈偏离经典运动.

我们将从 Schrödinger 在 1926 年提出的谐振子波包开始,在这里量子力学和经典力学的对应是直接的.然后讨论氢原子的量子力学波包,这里它和经典 Kepler 轨道的相似和对应已经是不完全的了.除对应以外,还有作为量子力学特点的波动性的明确显示.

量子力学与经典力学的一个基本差异是线性叠加原理.在从量子力学到经典力学过渡时,是什么机制使得叠加的各态间的相位关系丧失,从而这些态不再相干而只贡献独立的几率? 这个问题被称为"退相干"问题.除一般讨论外,我们还将介绍 W. Zurek 提供的一个答案,最后还将讨论实验室中实现的 Schrödinger 猫.

4.1 Schrödinger 的谐振子波包,相干态

在创立量子力学的过程中,W. Heisenberg 的观点是:类似电子轨道的这类概念应该完全否定,E. schrödinger 却更多地考虑量子力学和经典力学间的联系.量子力学中的一维谐

---

① ψ 是 x 与 t 的函数,在有必要时会写出它对宗量的依赖.

振子是很好的例子. 在低激发态，粒子的位置几率分布和经典分布差别极大，而当量子数 n 变得相当大时，量子力学分布逐渐接近经典分布. 这是 Bohr 对应原理的体现. 但能量本征态是定态，位置分布是和时间无关的. 能否找到能模拟经典振子运动的量子力学的含时波函数？即能否找出能满足

$$\langle \Psi(t) \mid x \mid \Psi(t) \rangle = A\cos(\omega t + \alpha) \tag{4.1.1}$$

关系的波函数 $\Psi(x,t)$ 呢？这个问题是 Schrödinger 在 1926 年解决的[1]，$\Psi(x,t)$ 应满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \Psi(x,t). \tag{4.1.2}$$

构成方程解的办法是：将 $\Psi(x,0)$ 用谐振子能量本征态展开，将展开的各项分别乘上相应的动力学相因子 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}$，结果就得到满足起始条件 $\Psi(x,0)$ 的方程式(4.1.2)的解. 一维谐振子的能量本征函数和本征值是

$$\psi_n = C_n \mathrm{e}^{-(m\omega/2\hbar)x^2} \mathrm{H}_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right), \tag{4.1.3}$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \tag{4.1.4}$$

此处 C_n 是归一化常数，

$$C_n = 2^{-n/2}(n!)^{-1/2}\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}, \tag{4.1.5}$$

H_n 是 Hermite 多项式. 将 $\Psi(x,0)$ 用 ψ_n 展开，有

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n C_n \mathrm{e}^{-(m\omega/2\hbar)x^2} \mathrm{H}_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right). \tag{4.1.6}$$

展开系数 c_n 由下式决定：

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\Psi(x,0)\mathrm{d}x. \tag{4.1.7}$$

在时间 t 的波包就是

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t}. \tag{4.1.8}$$

波包中心坐标是

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x \mid \Psi(x,t) \mid^2 \mathrm{d}x \\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty} c_n^* c_k \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(n-k)\omega t}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) x \psi_k(x)\mathrm{d}x.\end{aligned}$$

记上式最后一行的积分为 x_{nk}，上式可以写作

$$\langle x \rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty} c_n^* c_k x_{nk} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(n-k)\omega t}. \tag{4.1.9}$$

用本征函数式(4.1.3)可算出

$$x_{nk} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{k,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{k,n+1}\right], \tag{4.1.10}$$

将式(4.1.10)代回式(4.1.9)得

$$\langle x\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sum_{n=1}^{\infty}\sqrt{n}\,(c_n^*c_{n-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+c_{n-1}^*c_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}).\tag{4.1.11}$$

为了实现 $\Psi(x,t)$ 能模拟经典运动式(4.1.1)，需对波包的初态 $\Psi(x,0)$ 作一些限制. 令它的展开系数 $c_n=|c_n|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_n}$，令 $|c_n|$ 随 n 缓慢变化，$|c_n|\approx|c_{n-1}|$，$\phi_{n-1}-\phi_n=\alpha$ 与 n 无关，并令 c_n 只在 n 大的情况下才显著地不为 0(因此 $E_n\approx n\hbar\omega$)，此时式(4.1.11)即变为

$$\begin{aligned}\langle x\rangle&=\sqrt{\frac{2}{m\omega^2}}\Big(\sum_{n=0}^{\infty}\sqrt{E_n}\,|\,c_n\,|^2\Big)\cos(\omega t+\alpha)\\&=\sqrt{\frac{2}{m\omega^2}}\langle\sqrt{E}\rangle\cos(\omega t+\alpha)\end{aligned}\tag{4.1.12}$$

在以上推导中用了

$$\langle\sqrt{E}\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}\sqrt{E_n}\,|\,c_n\,|^2.\tag{4.1.13}$$

式(4.1.12)正是经典谐振子的轨道.

回过来再考虑式(4.1.8)，这是一个周期函数. 在 t 为经典周期 $T=2\pi/\omega$ 或其整数倍时，$\Psi(x,t_j)=\Psi(x,0)$. 波包并不随时间的进行而扩散.

上面构造的状态是一种相干态(coherent state). 在量子力学中这是一个重要概念，在物理学许多领域都有应用[2]. 以下对它作一个简单介绍.

4.1.1　相干态的基本性质

相干态是 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 的矢量 $|l\rangle$，其标记 l 一般是多分量的. 相干态有不同的定义，但它们之间有两点是共同的，即连续性和完全性(单位元分解). 定义矢量 $|\psi\rangle$ 的范数(norm)为 $\|\,|\psi\rangle\,\|\equiv\langle\psi|\psi\rangle^{\frac{1}{2}}$. 对 $|l\rangle\neq0$，$\|\,|l\rangle\,\|$ 为正实数. 相干态的连续性是：标记 l 连续变化趋近 l' 时，有 $\|\,|l'\rangle-|l\rangle\,\|\to0$. 这个条件决定了在一般情况下 $|l\rangle$ 和 $|l'\rangle$ 并不会因为 $l\neq l'$ 而正交. 连续性质决定了分立的正交矢量集 $\{|n\rangle:\ n=0,1,2,\cdots\}$ 不可能是相干态，因为 n 标记不是连续的. 此外，归一为 δ 函数的连续正交矢量 $\{|x\rangle:\ -\infty<x<\infty\}$ 也不是相干态. 虽然标记 x 是连续的，但 $\langle x|x'\rangle=\delta(x-x')$ 即矢量不是连续的：$\|\,|x'\rangle-|x\rangle\,\|$ 并不连续趋向极限 0. 因此，通常的自伴随算符的本征矢量并不构成相干态集合.

相干态的完全性是：存在正值的测度 δl，使得单位算符 I 可以分解为

$$I=\int|\,l\rangle\langle l\,|\,\delta l,\tag{4.1.14}$$

积分是在标记空间 $\mathscr{L}(l\in\mathscr{L})$ 中进行的. 这个性质和自伴随算符本征矢量的完全性不同，后者自动满足正交归一态 $|n\rangle$ 的完全条件 $\sum\limits_n|\,n\rangle\langle n\,|=I$，而相干态满足式(4.1.14)需要具体验证. 如果式(4.1.14)得到满足，它就诱导出 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 的一个表示，称为“连续表示”. $\mathscr{H}$ 中的矢量 $|\varphi\rangle$ 和算符 B 可以表示为

$$|\,\varphi\rangle=\int|\,l\rangle\langle l\,|\,\varphi\rangle\delta l,\tag{4.1.15}$$

$$\langle\varphi'\,|\,B\,|\,\varphi\rangle=\int\langle\varphi'\,|\,l'\rangle\langle l'\,|\,B\,|\,l\rangle\langle l\,|\,\varphi\rangle\delta l\delta l'.\tag{4.1.16}$$

$\langle l|\varphi\rangle$ 和 $\langle l'|B|l\rangle$ 分别是矢量 $|\varphi\rangle$ 和算符 B 在连续表示中的代表. 对范数有限的矢量 $|\varphi\rangle$($\langle\varphi|\varphi\rangle$

为有限)，其连续表示的代表$\langle l|\varphi\rangle$是平方可积的，即 $\langle\varphi|\varphi\rangle=\int\langle\varphi|l\rangle\langle l|\varphi\rangle\delta l=\int|\langle l|\varphi\rangle|^2\delta l$ 为有限. 连续表示的函数$\langle l|\varphi\rangle$满足积分方程

$$\langle l \mid \varphi\rangle = \int\langle l \mid l'\rangle\langle l' \mid \varphi\rangle\delta l', \tag{4.1.17}$$

积分方程的核

$$\mathscr{K}(l;\, l') = \langle l \mid l'\rangle \tag{4.1.18}$$

称复制核(reproducing kernel). 由于连续性条件，核$\langle l|l'\rangle$是联合连续的，由于它在 $l=l'$时不为 0，因此在 l 的开邻域中的所有 l' 值处都不为 0. 从 $\||l\rangle-|l'\rangle\|^2=\langle l'|l'\rangle+\langle l|l\rangle-2\mathrm{Re}\langle l'|l\rangle$看，连续性条件和复制核的联合连续是互为因果的、这点和通常的基不同、对通常的基，也有类似的积分方程. 但由于正交归一性，它变为一个平庸的等式，不对函数给出任何限制，而式(4.1.17)是对表示函数的真实条件. 和通常的基不同，相干态是线性相关的：

$$| l'\rangle = \int | l\rangle\langle l \mid l'\rangle\delta l', \tag{4.1.19}$$

即任何相干态都可以表示为其他相干态的线性和或积分. 因此，相干态可以称为"过完全"(overcomplete)的态的一族.

最后，我们注意到

$$\| \mid l\rangle - \mid l'\rangle \|^2 = \langle l' \mid l'\rangle + \langle l \mid l\rangle - 2\mathrm{Re}\langle l' \mid l\rangle,$$

因此矢量的连续性是复制核的联合连续性的简单结果.

上述的连续性和单位元分解两个性质以及其推论，对各种相干态都适用. 具体到某一类相干态，还会有其特定的性质.

4.1.2 正则相干态

正则相干态是相消灭算符 a 和产生算符 $a^\dagger$ 生成的①. 它们满足对易关系

$$[a, a^\dagger] = I. \tag{4.1.20}$$

归一的基准态(或称真空态)$|0\rangle$满足

$$a \mid 0\rangle = 0. \tag{4.1.21}$$

将 $a^\dagger$ 重复作用在$|0\rangle$上得到的各态张成状态空间，它的正交归一的基矢量为

$$| n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n \mid 0\rangle. \tag{4.1.22}$$

从对易关系式(4.1.20)可知，$|n\rangle$是数算符

$$N = a^\dagger a \tag{4.1.23}$$

的本征态，相应的本征值是 n：

$$N \mid n\rangle = n \mid n\rangle. \tag{4.1.24}$$

a 和 $a^\dagger$ 分别是减少和增加数本征值 1 单位的算符：

$$\begin{aligned} Na \mid n\rangle &= (n-1) \mid n\rangle, \\ Na^\dagger \mid n\rangle &= (n+1) \mid n\rangle. \end{aligned} \tag{4.1.25}$$

正则相干态是在基准态$|0\rangle$上作幺正变换得到的：

---

① 请参阅量子力学教科书中有关二次量子化的内容.

$$| z\rangle = \mathrm{e}^{za^\dagger - z^* a} | 0\rangle. \tag{4.1.26}$$

量子力学中最有用的公式之一是 Baker-Campbell-Hausdorff 公式①：

$$\mathrm{e}^{A+B} = \mathrm{e}^A \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}[A,B]} \mathrm{e}^B = \mathrm{e}^B \mathrm{e}^{\frac{1}{2}[A,B]} \mathrm{e}^A. \tag{4.1.27}$$

公式的另一形式是

$$\mathrm{e}^A B \mathrm{e}^{-A} = B + [A,B] + \frac{1}{2!}[A,[A,B]] + \cdots + \frac{1}{n!}[A,[A,[\cdots[A,B]]\cdots]] + \cdots \tag{4.1.28}$$

如果$[A,B]$与 A 和 B 对易，就有

$$\mathrm{e}^{A+B} = \mathrm{e}^A \mathrm{e}^B \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}[A,B]} = \mathrm{e}^B \mathrm{e}^A \mathrm{e}^{\frac{1}{2}[A,B]}. \tag{4.1.29}$$

由于$[za^\dagger, z^* a] = -zz^*$ 是 c 数，式(4.1.26)可以用式(4.1.29)写作

$$| z\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|z|^2} \mathrm{e}^{za^\dagger} \mathrm{e}^{-z^* a} | 0\rangle. \tag{4.1.30}$$

再用式(4.1.21)和式(4.1.22)，有

$$| z\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2} | z |^2\right) \mathrm{e}^{za^\dagger} | 0\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2} | z |^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} z^n | n\rangle. \tag{4.1.31}$$

在定义式(4.1.26)中开始 z^* 是出现的，但由于式(4.1.21)，它最后并没有进入式(4.1.31)。因此，标记正则相干态只用 z 已足够. 从式(4.1.31)直接得到

$$\langle z_2 | z_1 \rangle = \exp\left(-\frac{1}{2} | z_2 |^2 + z_2^* z_1 - \frac{1}{2} | z_1 |^2\right), \tag{4.1.32}$$

它是 z_1 和 z_2 的连续函数，对任何两个复数 z_1 和 z_2 它都不为 0. 下面验证单位元的分解成立. 对复数 z 的积分测度是(用极坐标)

$$\mathrm{d}^2 z = \mathrm{d}(\mathrm{Re}z)\mathrm{d}(\mathrm{Im}z) = | z | \mathrm{d} | z | \mathrm{d}\theta, \tag{4.1.33}$$

因此

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi}\int | z\rangle\langle z | \mathrm{d}^2 z &= \frac{1}{\pi} \sum_{n,m} \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \int \mathrm{e}^{-|z|^2} z^{*n} z^m | m\rangle\langle n | \mathrm{d}^2 z \\ &= \sum_n \frac{1}{(n!)} \int \mathrm{e}^{-|z|^2} | z |^{2n} | n\rangle\langle n | \mathrm{d} | z |^2 \\ &= \sum_n | n\rangle\langle n | = I. \end{aligned} \tag{4.1.34}$$

在上面的推导中用到了 $z^{*n} z^m = |z|^{m+n} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-n)\theta}$ 和 $\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(m-n)\theta} = 2\pi\delta_{mn}$，最后的等式是因为 $|n\rangle$(见式(4.1.22))是正交归一完备集而成立的. 验证完毕.

经常会遇到计算对易子$[\mathrm{e}^{-za^\dagger}, a]$这类问题. 如果函数 $f(a^\dagger)$可以通过 $a^\dagger$ 表示(例如展为幂级数)，则有

$$[f(a^\dagger), a] = \frac{\partial f}{\partial a^\dagger}[a^\dagger, a] = -\frac{\partial f}{\partial a^\dagger}, \tag{4.1.35}$$

$$[f(a), a^\dagger] = \frac{\partial f}{\partial a}[a, a^\dagger] = \frac{\partial f}{\partial a}. \tag{4.1.36}$$

从以上关系可得

$$[\mathrm{e}^{-za^\dagger}, a] = z\mathrm{e}^{-za^\dagger},$$

---

① 在 W. H. Louisell 所著 Quantum Statistical Properties of Radiation 书中关于算符代数的一章中有许多有用的定理和公式.

因此有

$$e^{-za^\dagger}ae^{za^\dagger}=a+z. \tag{4.1.37}$$

将式(4.1.37)左右双方作用于$|0\rangle$，得

$$e^{-za^\dagger}ae^{za^\dagger}\mid 0\rangle=(a+z)\mid 0\rangle=z\mid 0\rangle.$$

用$|z\rangle$的定义式(4.1.31)，有

$$e^{-za^\dagger}ae^{za^\dagger}\mid 0\rangle=e^{-za^\dagger}ae^{|z|^2/2}\mid z\rangle=e^{-za^\dagger}e^{|z|^2/2}a\mid z\rangle$$

将上面二式右方相等，得

$$a\mid z\rangle=e^{za^\dagger}e^{-|z|^2/2}z\mid 0\rangle=z\mid z\rangle. \tag{4.1.38}$$

正则相干态是消灭算符 a 的本征态，本征值是 z，这是正则相干态的一个重要性质. 它的标志 z 就是 a 的本征值. 从式(4.1.38)得

$$\langle z\mid a\mid z\rangle=z.$$

正则相干态的标记 z 就是消灭算符在相干态的平均值. 算符 a 和 $a^\dagger$ 的不确定关系是

$$\langle a^\dagger a\rangle\geqslant\langle a^\dagger\rangle\langle a\rangle. \tag{4.1.39}$$

对正则相干态，有①

$$\langle z\mid a^\dagger a\mid z\rangle=z^*z=\langle z\mid a^\dagger\mid z\rangle\langle z\mid a\mid z\rangle, \tag{4.1.40}$$

即式(4.1.39)的等式成立. 因此正则相干态是最小不确定态.

正规排序算符是所有的消灭算符要位于所有产生算符的右面. 表示办法是在算符左右加上"：". 例如，$:aa^\dagger:\equiv a^\dagger a$. 对正规排序算符取相干态的矩阵元，有

$$\langle z\mid :F(a^\dagger a):\mid z'\rangle=F(z^*,z')\langle z\mid z'\rangle. \tag{4.1.41}$$

最后回到谐振子问题. 谐振子可以用产生和消灭算符描述：

$$a=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(q+\mathrm{i}\frac{p}{m\omega}\right), \tag{4.1.42a}$$

$$a^\dagger=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(q-\mathrm{i}\frac{p}{m\omega}\right), \tag{4.1.42b}$$

此处 q 和 p 是谐振子的坐标和动量算符. Hamilton 算符变为

$$H=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}m\omega^2q^2=\hbar\omega\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right) \tag{4.1.43}$$

粒子数算符 $N=a^\dagger a$ 的本征值为 $n(z=0,1,2\cdots)$，谐振子的量子数 n 成为粒子数表示的粒子数 n. 正则相干态表示为谐振子本征态，

$$\mid z\rangle=\exp\left(-\frac{1}{2}\mid z\mid^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n!}}z^n\mid n\rangle. \tag{4.1.44}$$

这个相干态随时间如何变化呢？只要将 $e^{-(\mathrm{i}/\hbar)\hat{H}t}$ 作用于$|z\rangle$即可. 暂时略去零点能$\frac{1}{2}\hbar\omega$，它最终提供一个相因子 $e^{\mathrm{i}(1/2)\omega t}$，不影响相干态的结果. 演化算符 $e^{-(\mathrm{i}/\hbar)\hat{H}t}=e^{-\mathrm{i}\omega a^\dagger at}$. 它作用于$|z\rangle$给出

$$\begin{aligned}e^{-\mathrm{i}\omega a^\dagger at}\mid z\rangle&=\exp\left(-\frac{1}{2}\mid z\mid^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n!}}z^ne^{-\mathrm{i}\omega nt}\mid n\rangle\\&=\exp\left(-\frac{1}{2}\mid z\mid^2\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n!}}(ze^{-\mathrm{i}\omega t})^n\mid n\rangle=\mid e^{-\mathrm{i}\omega t}z\rangle.\end{aligned} \tag{4.1.45}$$

---

① 式(4.1.38)的共轭是$\langle z|a^\dagger=\langle z|z^*$.

结果是一个新的相干态，其标记为 $e^{-i\omega t}z$. 谐振子的正则相干态随时间的演化归结为其标记随时间的演化. 它的演化过程是稳定的，即仍保持为相干态，仍是最小不确定态. Schrödinger 给出的谐振子波包（见式(4.1.6)）及其演化（见式(4.1.8)）正是这种相干态. 将 x 用 $a, a^\dagger$ 表示，有

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger+a), \tag{4.1.46}$$

因此

$$\langle z(t)\mid x\mid z(t)\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle z\mid e^{i\omega t a^\dagger a}(a^\dagger+a)e^{-i\omega t a^\dagger a}\mid z\rangle.$$

利用 Baker-Campbell-Hausdorff 公式，

$$\begin{aligned}\langle z(t)\mid x\mid z(t)\rangle&=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\langle z\mid a^\dagger\mid z\rangle e^{i\omega t}+\langle z\mid a\mid z\rangle e^{-i\omega t}]\\&=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[z^* e^{i\omega t}+ze^{-i\omega t}]\\&=\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\mid z\mid\cos(\omega t-\phi).\end{aligned}$$

这就是 Schrödinger 的谐振子波包.

对受迫谐振子，外力可以线性依赖于振子的坐标 q 与动量 p，或等价地线性依赖于 a 与 $a^\dagger$，正则相干态的特点仍能保持①.

有关自族相干态将在第6章中讨论.

4.2　氢原子圆轨道波包与径向波包

Schrödinger 在1926年文章[1]中提到，氢原子中的电子运动轨道也可以用类似谐振子的办法处理，即用叠加能量本征态得到的量子力学波包来模拟. 但在1929年他致函 Lorentz 时说他在这个问题上遇到极大的计算上的困难. 以后就没有再提及此事了. 分析一下谐振子波包的构成，就不难明白构成氢原子 Kepler 轨道波包的困难. 式(4.1.8)是严格的周期函数，它在经过一个周期 $T=2\pi/\omega$ 或其整数倍后总要恢复原状. 这是由于动力学相因子是

$$e^{-i(E_n/\hbar)t}=e^{-i(n+1/2)\omega t},$$

对 n 求和的叠加不会改变其周期性. 这只是在谐振子能级随 n 的变化是严格线性的，即各能级是等距的情况下才会出现. 氢原子的能级远不是等距的，特别对低激发态更是如此. 要想模拟电子在氢原子中轨道的量子力学波包，只能利用很高激发态的能级. 氢原子能量本征值是

$$E_n=-\frac{(Ze^2)^2m}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \tag{4.2.1}$$

由此得

$$\frac{\partial E_n}{\partial n}=\frac{(Ze^2)^2m}{\hbar^2}\frac{1}{n^3}=\hbar\omega_{cl}, \tag{4.2.2}$$

此处 ω_{cl} 是电子在轨道 n 上的经典角频率②. 在 n 值很大时两个相邻能级间距的差别是

---

① 可参阅 Merzbacher E. Quantum Mechanics. 2nd edition. New York: John Wiley, 1970, Chapter 15, § 9.

② 从 Bohr 理论有 $\frac{Ze^2}{r^2}=mr\omega_{cl}^2$, $r_n=\frac{n^2\hbar^2}{Ze^2m}$，故有 $\omega_{cl}=\frac{(Ze^2)^2m}{n^3\hbar^3}$.

$O(n^{-3})$，用 n 值很大的波函数叠加可望能获得模拟经典运动的波包.

L. S. Brown[3] 在 1973 年构成了沿氢原子圆轨道运动的波包. 量子力学氢原子波函数最接近圆轨道的是 $n, l=n-1, m=\pm l$ 态的. $l=n-1$ 态的波函数在径向没有节点，$l, m=\pm l$ 的球谐函数有 $(\sin\theta)^l$ 因子，使 ψ 在 $\theta=\pi/2$（xy 平面）有极大值. $m=\pm l$ 与 $m=-l$ 由于相应波函数为 $e^{\pm il\phi}$，可以和动力学相因子配合分别作为正反向运动的波包. 在径向波函数方面 $l=n-1$ 的解是

$$u_{nl}(r) = \text{const}\ r^n e^{-\kappa_n r}, \quad \kappa_n = \frac{Ze^2 m}{\hbar^2 n} \tag{4.2.3}$$

令 $\kappa_n r \equiv x$，则上式函数形式为

$$f(x) = x^n e^{-x}$$

是 Poisson 分布. 它在 $x=n$ 处有极大值. 实际上在 n 大时它变为 Gauss 分布. 令 $x=n+\xi$，此处 $\xi \ll n$，在 n 大时有

$$x = n\left(1+\frac{\xi}{n}\right) \approx n\exp\left[\frac{\xi}{n} - \frac{1}{2}\left(\frac{\xi}{n}\right)^2\right]$$

并有

$$f(x) \approx n^n e^{-n} \exp\left[-\frac{1}{2}n(\xi/n)^2\right], \quad n \gg 1, \tag{4.2.4}$$

回到式(4.2.3)①，并用 $l=n-1$ 作为指标，写出常用的 $\frac{1}{r}u_{l+1,l}$ 形式：

$$\frac{1}{r}u_{l+1,l}(\boldsymbol{r}) = \text{const} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2l}\left(l - \frac{r}{la}\right)^2\right], \quad l \gg 1. \tag{4.2.5}$$

它显示出 Gauss 形式，r 在 $r_p = l^2 a$ 处有极大值，分布的均方根值为 $\Delta r = (2l)^{-1/2} r_p$. 角度的球谐函数是

$$Y_l^l(\theta,\phi) = \text{const}\ e^{il\phi}(\sin\theta)^l.$$

在 l 大时可取近似：

$$\sin\theta = \cos\left(\theta - \frac{1}{2}\pi\right) \approx 1 - \frac{1}{2}\left(\theta - \frac{1}{2}\pi\right)^2 \approx \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\theta - \frac{1}{2}\pi\right)^2\right].$$

总的波函数结果是

$$\psi_{l+1,l,l}(\boldsymbol{r}) = \text{const} \cdot e^{-(r-l^2a)^2/2l^3a^2} e^{il\phi} \exp\left[-\frac{1}{2}l(\theta - \pi/2)^2\right]. \tag{4.2.6}$$

这是一个在 xy 平面上半径为 $l^2 a$ 的环状定态波包. 要得到在这个环上以角频率 ω_{cl} 转动的球形波包，就需取在平均值 $\bar{l}$（很大）附近的这类波函数叠加：

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \sum A_l e^{-i(E_l/\hbar)t} \psi_{l+1,l,l}(\boldsymbol{r}), \tag{4.2.7}$$

系数 A_l 在 $\bar{l}$ 处有很高的峰值. 在 $\bar{l}$ 附近求和用指标 s 实现：

$$l = \bar{l} + s, \quad s \ll \bar{l}. \tag{4.2.8}$$

$$E_l = E_{\bar{l}} + \left.\frac{\partial E_l}{\partial l}\right|_{\bar{l}} s + \frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 E_l}{\partial l^2}\right|_{\bar{l}} s^2 + \cdots. \tag{4.2.9}$$

从 $E_n = -(Ze^2)^2 m/2\hbar^2 n^2$ 可得

---

① 在式(4.2.4)中将最后的指数因子写成 $e^{-(1/2l)(\kappa r-l)^2}$，$\kappa=\frac{1}{na}$（$a$ 为 Bohr 基态半径 $\hbar^2/Ze^2m$）. 最后在式(4.2.5)中只保留指数上和 r 直接有关的部分，其他都并入常数因子.

$$\frac{\partial E_l}{\partial l}=\frac{(Ze^2)^2m}{\hbar^2(l+1)^2}=\hbar\omega_{\rm cl}, \tag{4.2.10}$$

此处

$$\omega_{\rm cl}=\frac{(Ze^2)^2m}{n^3\hbar^3}, \tag{4.2.11}$$

是 Bohr 经典轨道角频率. 此外还有

$$\frac{1}{2}\frac{\partial^2 E_l}{\partial l^2}=-\frac{3(Ze^2)^2m}{2\hbar(l+1)^4}=-\frac{3}{2}\frac{\hbar\omega_{\rm cl}}{l+1}. \tag{4.2.12}$$

将式(4.2.8)～式(4.2.12)代回式(4.2.7)，得

$$\Psi(\boldsymbol{r},t)=e^{-i(E_{\bar{l}}/\hbar)t}\psi_{\bar{l}+1,\bar{l},\bar{l}}(\boldsymbol{r})F(\phi-\omega_{\rm cl}t,t), \tag{4.2.13}$$

此处

$$F(\phi-\omega_{\rm cl}t,t)=\sum_s A_{\bar{l}+s}e^{is(\phi-\omega_{\rm cl}t)}\exp\left(i\frac{3}{2}\frac{\omega_{\rm cl}t}{\bar{l}+1}s^2\right). \tag{4.2.14}$$

上式右方第二个指数因子在 t 小时($\omega_{\rm cl}t\ll\bar{l}$)接近于 1，暂时把它当作 1，这样

$$F(\phi-\omega_{\rm cl}t,t)\approx f(\phi-\omega_{\rm cl}t)=\sum_s A_{\bar{l}+s}e^{is(\phi-\omega_{\rm cl}t)}, \tag{4.2.15}$$

此处 F 只通过 $\phi-\omega_{\rm cl}t$ 与 t 相关. 如选择 $A_{\bar{l}+s}$ 使得 $f(\phi)$ 函数在 $\phi=\phi_p$ 处有峰值，则波包在时间 t 就在 $\phi=\phi_p+\omega_{\rm cl}t$ 处有峰值. 这相当于在圆轨道上的匀速转动，且是完全周期性的. 但当时间足够长，$\omega_{\rm cl}t\approx\bar{l}$ 时，第二个指数因子便起作用，使波包弥散. 这个因子来源于 $\left.\frac{\partial^2E_l}{\partial l^2}\right|_{\bar{l}}$，它反映了即使 $\bar{l}$ 很大时能级也有对等距的偏离. 这个相位随 l 的变化导致弥散. 考虑 Gauss 模型

$$A_{\bar{l}+s}=\text{const}\cdot e^{-s^2[\Delta\phi(0)]^2}. \tag{4.2.16}$$

式(4.2.14)给出

$$\begin{aligned}F(\phi-\omega_{\rm cl}t,t)&=\text{const}\int_{-\infty}^{\infty}ds\ e^{-s^2[\Delta\phi(0)]^2}e^{is(\phi-\omega_{\rm cl}t)}\exp\left(i\frac{3}{2}\frac{\omega_{\rm cl}t}{\bar{l}}s^2\right)\\&=\text{const}\cdot\exp\left\{-\frac{1}{4}\frac{(\phi-\omega_{\rm cl}t)^2}{[\Delta\phi(0)]^2-\frac{3}{2}i\omega_{\rm cl}/\bar{l}}\right\}\end{aligned} \tag{4.2.17}$$

因此

$$|F(\phi-\omega_{\rm cl}t,t)|^2=\text{const}\cdot\exp\left\{-\frac{(\phi-\omega_{\rm cl}t)^2}{2[\Delta\phi(t)]^2}\right\}, \tag{4.2.18}$$

其中

$$[\Delta\phi(t)]^2=[\Delta\phi(0)]^2+\left(\frac{3\omega_{\rm cl}t}{2\bar{l}\Delta\phi(0)}\right)^2. \tag{4.2.19}$$

式(4.2.14)给出的分布保持了 Gauss 形式，但它的宽度 $\Delta\phi(t)$ 是随时间增加的(见式(4.2.19)).

关于用原子高激发态(Rydberg 态)波包的讨论，从 20 世纪 80 年代后期又兴旺起来. 原因是由于短脉冲激光器的发展，使得在实验上产生波包成为可能. J. Parker 和 C. R. Srroud, Jr[4] 的计算表明，ps 激光短脉冲具有相当宽的频谱，能将原子相干地激发到相当数量的 Rydberg 态上. 脉冲过后形成的波包自由振荡，并发出辐射而衰变. 这和经典轨道上的电子一样. 此处波包还扩展、弥散和恢复，显示出非经典的波动性质. 波包的形成可以用半经典模型描述. 令基态和激发态的相互作用绘景振幅为 $a_g(t)$ 和 $a_n(t)$，它们满足方程

$$\dot{a}_g=-\frac{1}{2}i\sum_n\Omega_n a_n(t)f(t)e^{-i\Delta_n t}, \tag{4.2.20}$$

$$\dot{a}_n = -\frac{1}{2}\mathrm{i}\Omega_n a_g(t) f(t) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Delta_n t}. \tag{4.2.21}$$

此处 $f(t)$是激光脉冲的包络线，脉冲频率中心对 $g\to n$ 跃迁的失谐为Δ_n. Ω_n 是跃迁的 Rabi 频率①. 将方程式(4.2.20)，式(4.2.21)对一些例子进行数值积分，用 6～10ps(半峰值处全宽度)脉冲，中心频率激发 $n=85$ Rydberg 态. 命此 n 值为$\bar{n}$. 计算表明，此脉冲可显著地激发在$\bar{n}$附近的 5～10 个能级. 因此在形成波包时计算 $60\leqslant n\leqslant 110$ Rydberg 态是安全的. 在自发衰变计算中考虑从 g(基态)一直到 $n=59$ 作为可能的末态. Rydberg 电子的波函数

$$\Psi_R(r,t) = \sum_n a_n(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n t}u_n(r), \tag{4.2.22}$$

ω_n 是从基态到各态的跃迁频率，$u_n(r)$是径向波函数. 只用径向波函数叠加，形成的称为径向波包. 它在 $r_{\min}$ 到 $r_{\max}$之间振荡. 由于角动量选择定则，激光不能激发足够数量的角动量态，因此在角度上波包是非定域的. 图 4.1(a)绘出波包 $r^2|\psi_R(r,t)|^2$ 在激光脉冲后的发展.

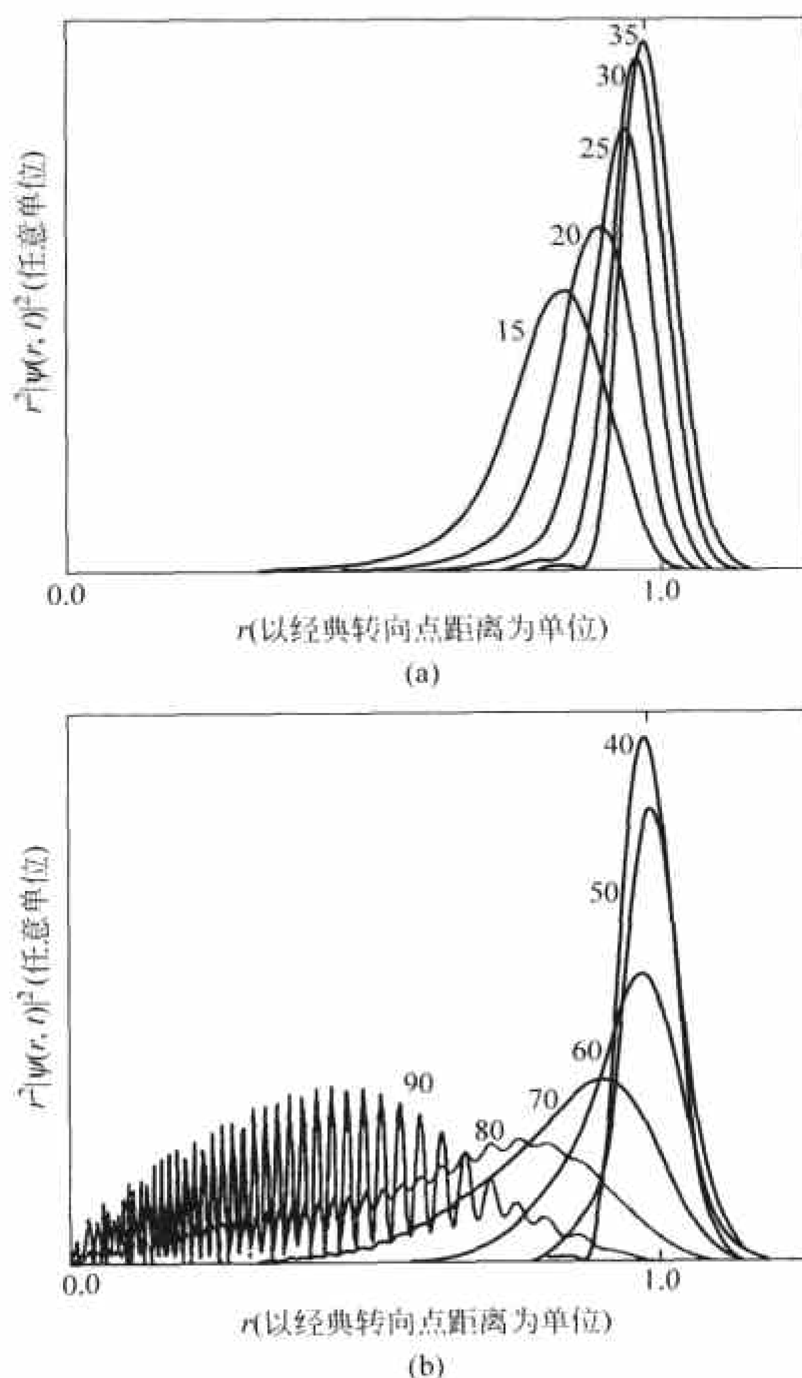


图 4.1 径向波包的运动. 取自[4]

(a) 波包向经典转向点运动；(b) 波包返回

① 体系 $t=0$ 时位于态 i，在 t 时仍位于态 i 的几率为 $P=\cos^2\Omega_{ij}t$. Ω_{ij} 即为跃迁 $i\to j$ 的 Rabi 频率.

曲线上的数值代表时间(ps)．波包形成，同时向经典转向点运动，同时变窄．用 Gauss 脉冲包络线进行计算，在转向点处波包的不确定性是 $\Delta p \Delta r = 0.53\ \hbar$，接近最小不确定波包．由于转向点相当轨道的远日点，在它附近电子速度最小，故波包变高、变窄．图 4.1(b)绘出波包返回情况．当波包趋近核所在地时它被 Coulomb 势所散射．波包的往返周期正是 $\bar{n}=85$ 态相应的 Kepler 轨道周期，此得是 93.4ps．几个往返之后波包弥散．但经过相当长时间后它重新恢复．如增加激光脉冲频率使 $\bar{n}$ 值增加，同时又不改变 Δn 数值(这需要较窄的频谱，即更长的脉冲时间)，则波包能持续更长时间．

原子偶极自发辐射功率为

$$P(t) = \frac{4e^2}{3c^3}\langle \Psi_R \mid \ddot{\boldsymbol{r}}(t) \cdot \ddot{\boldsymbol{r}}(t) \mid \Psi_R \rangle$$

$$= \frac{4e^2}{3c^3}\left\langle \Psi_R \left| \frac{e^2 \boldsymbol{r}}{mr^3} \cdot \frac{e^2 \boldsymbol{r}}{mr^3} \right| \Psi_R \right\rangle. \tag{4.2.23}$$

对波包 Ψ_R 加速度平方的期待值显然是在近日点附近最大，在远日点附近最小．图 4.2 给出自发辐射强度，时间间隔为 3ns，约为 32 个周期．开始时辐射强度明显地显示出在近日点附近的峰值，间隔正好是 93.4ps．在 2.6ns 附近再现了这种规律性，意味波包重新恢复．在它们之间出现复杂的图样：峰值出现的频率为基本频率的 2,3,4 倍．欲求辐射功率随时间的变化，用式(4.2.21)的积分代入式(4.2.22)，式(4.2.23)，得出结果如下：

$$P(t) \propto |\Phi(t)|^2$$

其中

$$\Phi(t) \propto \sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}(n-\bar{n})\omega_{\mathrm{cl}} t} \exp\left[\mathrm{i}\,\frac{3}{2}\,\frac{\omega_{\mathrm{cl}}}{\bar{n}}(n-\bar{n})^2 t\right]. \tag{4.2.24}$$

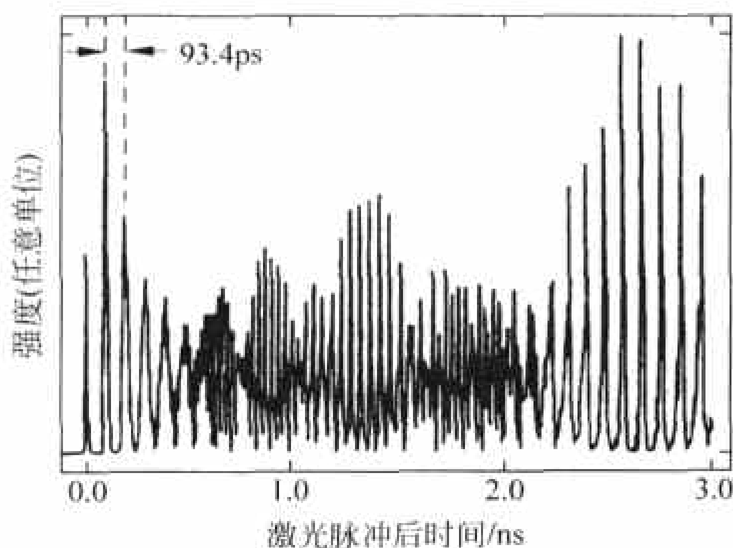


图 4.2　自发辐射强度．取自[4]

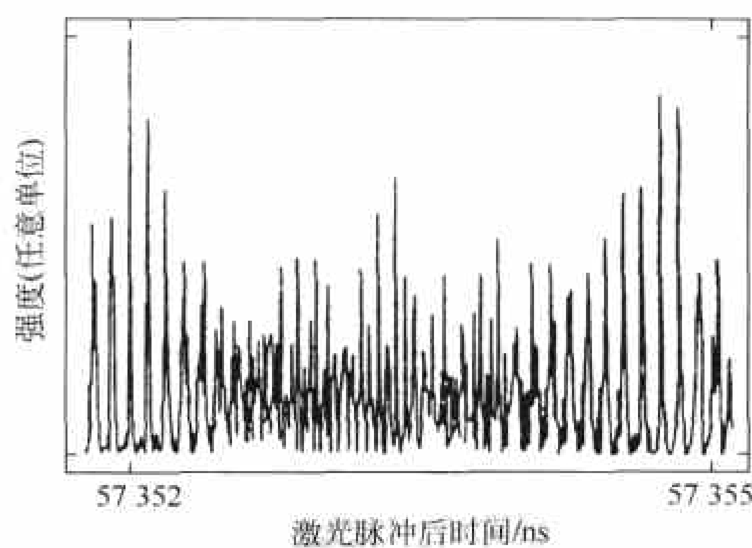


图 4.3　波包恢复．取自[4]

求和只取在 $\bar{n}$ 附近少数能级(如上所述 6～10 个能级)已足够．式右方第一个因子是周期性的，第二个指数因子代表能级间距偏离常数的效应．在上面的式(4.2.14)也曾出现过这个因子，它导致波包弥散．波包弥散后经较长时间 $t=\frac{\bar{n}}{3}\frac{2\pi}{\omega_{\mathrm{cl}}}\equiv\frac{\bar{n}}{3}T_0$ (T_0 为经典运动周期)，第二个因子变为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi(n-n)^2}$，波包重新恢复，$P(t)$ 也恢复原值．恢复周期是

$$T_{\mathrm{rev}} = \frac{\bar{n}}{3}T_0. \tag{4.2.25}$$

在 Parker 和 Stroud 计算的例子中，$\bar{n}=85$，$T_{rev}=2.636$ns. 在两次恢复之间还有"分数恢复"，将在 4.4 节讨论. 在图 4.3 中可看出波包的恢复. 在式(4.2.24)中没有写出的还有 E_n 随 $(n-\bar{n})$ 变化的高次项. 相应的恢复时间分别与 $\bar{n}^2 T_0$，$\bar{n}^3 T_0$，…成正比. 例如在 $t=\bar{n}^3 T_0=$ 57 352ns 能保证 $(n-\bar{n})^4$ 以前的各项都是周期的. 图 4.3 显示这一更高阶的恢复.

4.3 氢原子的 $SO(4)$ 对称性，Runge-Lenz 矢量，Kepler 椭圆轨道波包

在组成椭圆轨道波包时，起关键作用的是与椭圆轨道直接有关的守恒量，即 Runge-Lenz 矢量. 它在量子力学中的推广导致构造椭圆轨道波包的成功.

更重要的是，量子力学的 Runge-Lenz 矢量还导致对氢原子问题的更深的理解，即它具有 $SO(4)$ 动力学对称性. 在量子力学中确定一个体系的能谱，通常要解 Hamilton 量的本征函数和本征值问题，但也可以从对称性出发. 如果对体系的对称性有充分了解，就能够求得与对称性相应的守恒量完备集，则体系的性质，包括其能谱在内，就完全解出了. 这类体系称为是完全可积的. 氢原子就是这样一个体系. Pauli[5] 首先发现了氢原子具有比 $SO(3)$（三维旋转对称）更高的对称性 $SO(4)$，以后 Fock[6] 也得到同样结果. 量子力学的 Runge-Lenz 矢量算符就是将 $SO(3)$ 扩充到 $SO(4)$ 所需的附加生成元①.

4.3.1 经典 Kepler 运动的 Runge-Lenz 矢量

经典 Kepler 运动是质量为 m 的质点在有心势场②

$$V(r)=-\frac{k}{r} \tag{4.3.1}$$

中的运动. 对类氢原子，$k=Ze^2$. 运动轨道是圆锥曲线，用极坐标 (r,θ) 表示，其方程是

$$\frac{1}{r}=\frac{mk}{l^2}(1+e\cos\theta), \tag{4.3.2}$$

此处 l 是角动量 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 的大小，e 是轨道离心率，它和 l 以及能量 E 的关系是

$$e=\left(1+\frac{2El^2}{mk^2}\right)^{1/2}. \tag{4.3.3}$$

E 和 $\boldsymbol{L}$ 都是运动常数. 对 $E>0$ 的轨道，$e>1$，是双曲线；对 $E<0$ 的轨道，$e<1$，是椭圆. 椭圆轨道的特例 $e=0$ 是圆轨道，相应能量为 $E=-\frac{mk^2}{2l^2}$. 椭圆轨道的一个重要特性是，其半长轴 a 只决定于能量，证明如下. 记长、短径③为 r_2 及 r_1. 在这两点径向速度为 0，方位角方向速度为 l/mr，因此能量守恒关系是

$$E=-\frac{k}{r}+\frac{1}{2}\frac{l^2}{mr^2}, \tag{4.3.4}$$

式中 r 取值为 r_1 或 r_2. 整理为 r 满足的方程，得

① 用 Runge-Lenz 矢量算符和角动量算符还可以构造更广泛的代数结构 Yangian，见本书第 11 章.

② 关于经典粒子的 Kepler 运动可参考 H. Goldstein 的 *Classical Mechanics*（第二版. Addison-Wesley, 1980）. 关于 Runge-Lenz 矢量以及它的量子力学推广，可参考 L. Schiff 的 *Quantum Mechanics*（第三版. Magraw-Hill, 1968）.

③ 即从焦点到轨道上最远和最近的距离.

$$r^2 + \frac{k}{E}r - \frac{l^2}{2mE} = 0. \tag{4.3.5}$$

方程的两个根之和应是

$$r_1 + r_2 = -\frac{k}{E},$$

它给出

$$a = \frac{r_1 + r_2}{2} = -\frac{k}{2E}, \tag{4.3.6}$$

证明了上面的提法.椭圆偏心率 e 与半长轴 a、半短轴 b 的关系是

$$e = (a^2 - b^2)^{1/2}/a. \tag{4.3.7}$$

从式(4.3.3)与式(4.3.6),可得

$$e = \left(1 - \frac{l^2}{mka}\right)^{1/2}. \tag{4.3.8}$$

运动常数 $\boldsymbol{E}$,$\boldsymbol{L}$ 给出后,轨道的形状及轨道平面都已确定,平面与 $\boldsymbol{L}$ 垂直.但轨道在平面上的方位并未确定,实际上还有一个运动常数存在.从运动方程

$$\dot{\boldsymbol{p}} = -\frac{k}{r^3}\boldsymbol{r} \tag{4.3.9}$$

出发,取它与 $\boldsymbol{L}$ 的矢量积,得

$$\dot{\boldsymbol{p}} \times \boldsymbol{L} = -\frac{k}{r^3}\boldsymbol{r} \times (\boldsymbol{r} \times m\dot{\boldsymbol{r}}) = mk\left(\frac{\dot{\boldsymbol{r}}}{r} - \frac{\dot{r}\boldsymbol{r}}{r^2}\right).$$

由于$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}=0$,左方可以写作$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})$,右方可改写为 $mk\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)$.因此有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L} - mk\,\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right) = 0. \tag{4.3.10}$$

定义

$$\boldsymbol{M} = \frac{1}{m}\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L} - k\,\frac{\boldsymbol{r}}{r}, \tag{4.3.11}$$

前式给出

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{M}}{\mathrm{d}t} = 0, \tag{4.3.12}$$

即 $\boldsymbol{M}$ 是守恒量,被称为 Runge-Lenz 矢量.一个显然成立的关系是

$$\boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{L} = 0, \tag{4.3.13}$$

即 $\boldsymbol{M}$ 位于轨道平面内.再计算

$$\boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{r} = \frac{1}{m}\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L} - kr = \frac{1}{m}l^2 - kr.$$

令 $\boldsymbol{M}$ 与 $\boldsymbol{r}$ 夹角为 θ,就有

$$Mr\cos\theta = \frac{1}{m}l^2 - kr,$$

或

$$\frac{1}{r} = \frac{mk}{l^2}\left(1 + \frac{M}{k}\cos\theta\right). \tag{4.3.14}$$

与式(4.3.2)比较,这正是轨道方程,θ 正是方位角.故 $\boldsymbol{M}$ 的方向是沿长轴的,且有

$$M = ke. \tag{4.3.15}$$

从式(4.3.9)可直接算得

$$\boldsymbol{M}^2 = \frac{2H}{m}\boldsymbol{L}^2 + k^2, \tag{4.3.16}$$

此处 H 是 Hamilton 量：

$$H = \frac{1}{2m}p^2 - \frac{k}{r}. \tag{4.3.17}$$

4.3.2 量子力学中的 Runge-Lenz 矢量，动力学对称与氢原子能级

将 Runge-Lenz 矢量(式(4.3.11))推广成为量子力学的算符，要遇到 $\boldsymbol{p}$ 与 $\boldsymbol{L}$ 的排序问题. W. Pauli[5] 采取对称化的排序，引入了

$$\boldsymbol{M} = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L} - \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}) - k\,\frac{\boldsymbol{r}}{r}. \tag{4.3.18}$$

依此定义，仍有

$$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{M} = \boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{L} = 0. \tag{4.3.19}$$

从式(4.3.18)可得

$$\boldsymbol{M}^2 = \frac{2H}{m}(\boldsymbol{L}^2 + \hbar^2) + k^2. \tag{4.3.20}$$

和经典关系式(4.3.16)比，多了一项 $\hbar^2$.

在物理学中，守恒量是与对称性联系在一起的. 在讨论与 Runge-Lenz 算符有关的守恒量以前，先要弄清楚算符的代数关系(对易关系). 在 Kepler 问题中 L^2, L_z 守恒是和三维空间转动 $SO(3)$ 联系的，这属于时空对称性. 在推导守恒量 $\boldsymbol{M}$ 时用到 Coulomb 作用(式(4.3.1)). 这是 Hamilton 量 H 的性质，这种对称性称为动力学对称性. 现在有 6 个算符 L_x, L_y, L_z; M_x, M_y, M_z. 已知的对易关系是

$$[L_x, L_y] = \mathrm{i}\,\hbar L_z, \tag{4.3.21}$$

以及另两个循环排列关系. $\boldsymbol{M}$ 与 $\boldsymbol{L}$ 分量的对易关系是

$$[M_x, L_x] = 0, \tag{4.3.22}$$

$$[M_x, L_y] = \mathrm{i}\,\hbar M_z, \tag{4.3.23}$$

$$[M_x, L_z] = -\mathrm{i}\,\hbar M_y, \tag{4.3.24}$$

以及另外 6 个循环排列的关系. $\boldsymbol{M}$ 分量间的对易关系比较复杂，涉及 H，它们是

$$[M_x, M_y] = -\frac{2\mathrm{i}\,\hbar}{m}HL_z, \tag{4.3.25}$$

以及另外两个循环排列的关系. 因为 H 出现在代数关系中，6 个算符 $\boldsymbol{L}, \boldsymbol{M}$ 并不封闭. 但如局限于 H 的一个本征值 E 有关的 Hilbert 子空间中，H 就可以被 E 代替. 进行重新标度，定义 $\boldsymbol{M}'$：

$$\boldsymbol{M}' = \left(-\frac{m}{2E}\right)^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{M}, \tag{4.3.26}$$

就有

$$[M'_x, M'_y] = \mathrm{i}\,\hbar L_z \tag{4.3.27}$$

以及另两个循环排列关系. 因式(4.3.22)，式(4.3.23)，式(4.3.24)对 M 的分量是线性的，

它们对$\boldsymbol{M}'$也是成立的. 由此可见，局限于一个固定本征值E并进行重新标度化就得到了封闭的李代数. 正因为标度化包括了因子E，因此，由代数关系便决定了能谱.

考虑四维空间旋转群$SO(4)$，其生成元是

$$L_{ij} = r_i p_j - r_j p_i, \quad i,j = 1,2,3,4 \tag{4.3.28}$$

共有6个独立的生成元，因为对角元$i=j$为0，而$L_{ij} = -L_{ji}$. 令

$$\left.\begin{aligned} &\boldsymbol{L}\text{ 为}(L_{23}, L_{31}, L_{12}), \\ &\boldsymbol{M}'\text{ 为}(L_{14}, L_{24}, L_{34}), \end{aligned}\right\} \tag{4.3.29}$$

即可由

$$[r_i, p_j] = \mathrm{i}\,\hbar\delta_{ij}, \quad i,j = 1,2,3,4 \tag{4.3.30}$$

实现$\boldsymbol{L},\boldsymbol{M}'$分量的对易关系. $so(4)$代数[①]包含两个$su(2)$子代数：

$$so(4) \supset su(2) \oplus su(2).$$

定义

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{I} &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{M}'), \\ \boldsymbol{K} &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{L} - \boldsymbol{M}'), \end{aligned}\right\} \tag{4.3.31}$$

容易验证任意I的分量与任意K的分量对易，而$\boldsymbol{I}$与$\boldsymbol{K}$分别组成两个$su(2)$代数，即有

$$[I_x, I_y] = \mathrm{i}\,\hbar I_z, \tag{4.3.32a}$$

$$[K_x, K_y] = \mathrm{i}\,\hbar K_z, \tag{4.3.32b}$$

以及以上两式的循环排列关系. 这两个代数是相互独立的：

$$[\boldsymbol{I}, \boldsymbol{K}] = 0. \tag{4.3.33}$$

此外还有

$$[\boldsymbol{I}, H] = 0, \quad [\boldsymbol{K}, H] = 0. \tag{4.3.34}$$

对易关系式(4.3.32)导致

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{I}^2 &= i(i+1)\,\hbar^2, \\ \boldsymbol{K}^2 &= \kappa(\kappa+1)\,\hbar^2, \end{aligned}\right\} i,\kappa = 0, \frac{1}{2}, 1, \cdots(\text{整数或半整数}). \tag{4.3.35}$$

$so(4)$是二秩代数，有两个Casimir算符：它们由生成元构成，但和所有生成元对易，可以选$\boldsymbol{I}^2,\boldsymbol{K}^2$，也可以选它们的组合

$$\begin{aligned} C &= \boldsymbol{I}^2 + \boldsymbol{K}^2 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{L}^2 + \boldsymbol{M}'^2), \\ C' &= \boldsymbol{I}^2 - \boldsymbol{K}^2 = \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{M}'. \end{aligned} \tag{4.3.36}$$

由于Kepler问题的特殊性，$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{M}'=0$，它相应的$so(4)$是个特殊的例子$\boldsymbol{I}^2=\boldsymbol{K}^2$，即量子数$i=\kappa$. 因此

$$C = 2\kappa(\kappa+1)\,\hbar^2, \quad \kappa = 0, \frac{1}{2}, 1, \cdots \tag{4.3.37}$$

从式(4.3.20)，式(4.3.26)有

$$C = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{L}^2 - \frac{m}{2E}\boldsymbol{M}^2\right) = -\frac{mk^2}{4E} - \frac{1}{2}\,\hbar^2.$$

---

① 李代数用小写，以区别于相应的李群.

和式(4.3.37)相比，解出 E，得

$$E=-\frac{mk^2}{2\hbar^2(2\kappa+1)^2}. \tag{4.3.38}$$

令 $n=2\kappa+1$，由 κ 的取值 $0,\frac{1}{2},1,\cdots$（见式(4.3.35)）得 n 的取值 $n=1,2,3,\cdots$，再代入 $k=Ze^2$，就有

$$E_n=-\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}, \tag{4.3.39}$$

正是氢原子的能级. 这里没有解 Schrödinger 方程，仅依靠动力学对称的代数性质就得出了能谱. V. A. Fock[6] 也提出了氢原子的 $SO(4)$ 对称性. 也参照文献[7].

动力学对称性在分析原子核集体运动中起了重要作用，这就是"相互作用 Bose 子模型".

4.3.3 Kepler 椭圆轨道波包的构成

M. Nauenberg[8] 用量子 Runge-Lenz 矢量构造了 Kepler 椭圆轨道的量子力学波包. 经典 Kepler 轨道位于 xy 平面，离心率为 e. 相应的两个 $\boldsymbol{M}$ 分量 M_x,M_y 和 L_z 组成 Coulomb 势束缚态 Hamilton 量 $SO(3)$ 对称的生成元①：

$$[M_x,M_y]=-2\mathrm{i}HL_z,\quad [L_z,M_x]=\mathrm{i}M_y,\quad [L_z,M_y]=-\mathrm{i}M_x, \tag{4.3.40}$$

此处

$$H=\frac{p^2}{2}-\frac{1}{r}. \tag{4.3.41}$$

我们考虑的实际上是二维氢原子问题②，它的能量本征值是

$$E_n=-\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2n^2},\quad n=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\cdots \tag{4.3.42}$$

相应的本征函数是

$$\psi(\rho,\phi)\propto \mathrm{e}^{\mathrm{i}l\phi}\rho^{|l|}\mathrm{e}^{-\rho/n}F(-n_\rho,2|l|+1,2\rho/n), \tag{4.3.43}$$

此处 (ρ,ϕ) 是极坐标，F 是合流超几何函数，三个量子数中只有两个是独立的：

$$\left.\begin{aligned} &l=0,\pm1,\pm2,\cdots,\\ &n_\rho=0,1,2,\cdots,\\ &n=n_\rho+|l|+\frac{1}{2}=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\cdots. \end{aligned}\right\} \tag{4.3.44}$$

从式(4.3.40)中 M_x,M_y 的对易关系可以得到相应力学量的不确定关系

$$\Delta M_x\Delta M_y\geqslant\frac{1}{2}|\langle-2HL_z\rangle|. \tag{4.3.45}$$

以下要证明，构成模拟经典轨道的量子波包的波函数是 H 的本征态并使 $\Delta M_x\Delta M_y$ 涨落最小，即等式(4.3.45)成立. 这些状态满足以下本征方程：

$$(M_x+\mathrm{i}\delta M_y)\psi=\eta\psi, \tag{4.3.46}$$

此处 δ 是实参数（将和离心率 e 联系起来），η 是非厄密算符 $M_x+\mathrm{i}\delta M_y$ 的本征值，因此可以是复数. 由于 M_x 与 M_y 不对易，ψ 并非它们的同时本征函数. ψ 同时还是 H 的本征函数：

---

① 在文献[8]中用原子单位 $Ze^2=\hbar=m=1$，本节(4.3.3 节)内容依此.

② 参阅 H. Mavomatis 的 *Exercises in Quantum Mechanics*（第二版 Kluwer，1992）例 8.3. 式(4.3.42)中 $m,Ze,\hbar$ 都恢复以便与三维情况比较.

$$H\psi = E_n\psi. \tag{4.3.47}$$

构成波包的基石便从式(4.3.46)，式(4.3.47)的解中选择，它们和椭圆轨道的离心率 e 有关. 式(4.3.46)给出

$$\langle M_x\rangle + \mathrm{i}\delta\langle M_y\rangle = \eta. \tag{4.3.48}$$

用算符 $M_x - \mathrm{i}\delta M_y$ 左乘式(4.3.46)，得

$$\begin{aligned}(M_x^2 + \mathrm{i}\delta[M_x, M_y] + \delta^2 M_y^2)\Psi &= (M_x^2 + 2\delta HL_z + \delta^2 M_y^2)\psi \\ &= \eta(M_x - \mathrm{i}\delta M_y)\psi,\end{aligned}$$

此式进一步给出

$$\begin{aligned}\langle M_x^2\rangle + 2\delta E_n\langle L_z\rangle + \delta^2\langle M_y^2\rangle &= \eta(\langle M_x\rangle - \mathrm{i}\delta\langle M_y\rangle) \\ &= \langle M_x\rangle^2 + \delta^2\langle M_y\rangle^2,\end{aligned}$$

最后一个等式根据式(4.3.48)得到. 右方二项移往左方，有

$$(\Delta M_x)^2 + \delta^2(\Delta M_y)^2 + 2\delta E_n\langle L_z\rangle = 0. \tag{4.3.49}$$

记 $\Delta M_x \Delta M_y = K$，式(4.3.49)能给出 K 为极小的条件

$$(\Delta M_x)^2 = \delta K, \quad (\Delta M_y)^2 = \frac{K}{\delta}. \tag{4.3.50}$$

代回式(4.3.49)，得

$$K = -E_n\langle L_z\rangle.$$

因此，最小不确定性可以在以下条件下达到：

$$\left.\begin{aligned}(\Delta M_x)^2 &= -E_n\delta\langle L_z\rangle, \\ (\Delta M_y)^2 &= -\frac{E_n}{\delta}\langle L_z\rangle.\end{aligned}\right\} \tag{4.3.51}$$

它说明式(4.3.46)，式(4.3.47)的共同解能达到最小不确定性，即式(4.3.45)等式成立.

引入升降算符 $A_\pm$：

$$A_\pm = \pm\frac{1}{(-2H)^{1/2}}(\delta M_x + \mathrm{i}M_y) - (1-\delta^2)^{1/2}L_z. \tag{4.3.52}$$

参数 δ 的范围是 $0 \leqslant \delta^2 \leqslant 1$. 考虑 $A_+\psi$：

$$A_+\psi = \left[\frac{1}{(-2H)^{1/2}}(\delta M_x + \mathrm{i}M_y) - (1-\delta^2)^{1/2}L_z\right]\psi, \tag{4.3.53}$$

左乘以$(M_x + \mathrm{i}\delta M_y)$，并将此算符和 A_+ 交换，利用对易关系式(4.3.40)，得

$$\begin{aligned}(M_x + \mathrm{i}\delta M_y)A_+\psi &= A_+(M_x + \mathrm{i}\delta M_y)\psi + A_+(-2H)^{1/2}(1-\delta^2)^{1/2}\psi \\ &= \eta A_+\psi + (-2E_n)^{1/2}(1-\delta^2)^{1/2}A_+\psi \\ &= \{\eta + [-2E_n(1-\delta^2)]^{1/2}\}A_+\psi.\end{aligned}$$

这个过程可以对 $A_+^2\psi, A_+^3\psi, \cdots$ 重复：

$$(M_x + \mathrm{i}\delta M_y)A_+^m\psi = \{\eta + m[-2E_n(1-\delta^2)]^{1/2}\}A_+^m\psi, \tag{4.3.54}$$

即 $A_+^m\psi$ 仍是 $M_x + \mathrm{i}\delta M_y$ 的本征态，相应本征值为 $\eta + m[-2E_n(1-\delta^2)]^{1/2}$. 类似的推演证明 $A_-^m\psi$ 仍是 $M_x + \mathrm{i}\delta M_y$ 的本征态，相应本征值为 $\eta - m[-2E_n(1-\delta^2)]^{1/2}$. Runge-Lenz 矢量的方向为椭圆轨道长轴，大小是(原子单位)e. 因此如选 η 为实数，从式(4.3.48)就有

$$\langle M_x\rangle = \eta, \quad \langle M_y\rangle = 0. \tag{4.3.55}$$

从 $\eta = 0$ 的解开始，用 A_+ 在本征函数上作用 m 次就得到

$$e = \langle M_x \rangle = m[-2E_n(1-\delta^2)]^{1/2}, \quad \langle M_y \rangle = 0 \tag{4.3.56}$$

的解. 显然，升降算符的作用会导致最高（最低）的 e 值. 考虑 H 与 $M_x + \mathrm{i}\delta M_y$ 的共同本征态 ψ_n^δ，它满足

$$A_+ \psi_n^\delta = \left[\frac{1}{(-2H)^{1/2}}(\delta M_x + \mathrm{i}M_y) - (1-\delta^2)^{1/2} L_z\right]\psi_n^\delta = 0. \tag{4.3.57}$$

从式(4.3.57)知 ψ_n^δ 态的有关期望值满足以下关系（先设定 $\langle M_y \rangle = 0$）：

$$\delta\langle M_x \rangle = (-2E_n)^{1/2}(1-\delta^2)^{1/2}\langle L_z \rangle. \tag{4.3.58}$$

从定义式(4.3.54)知道 ψ_n^δ 态的 $\langle M_x \rangle$ 已达最大可能值，此时式(4.3.56)中的 m 已达最大值，记为 l_n，即 $\langle M_x \rangle = l_n[-2E_n(1-\delta^2)]^{1/2}$. 从式(4.3.58)有 $\langle L_z \rangle = l_n\delta$. 至此，$\psi_n^\delta$ 的性质已经完全确定：它是 H 的本征态，本征值是 $-\frac{1}{2n^2}$；它是 $M_x + \mathrm{i}\delta M_y$ 的本征态，本征值是 $\frac{l_n}{n}(1-\delta^2)^{1/2}$. 此外还有 $\langle M_x \rangle = \frac{l_n}{n}(1-\delta^2)^{1/2}$，$\langle M_y \rangle = 0$，$\langle L_z \rangle = l_n\delta$，它也是最小不确定态. 这就是构筑椭圆轨道波包的基石. 量子数 l_n 是和最大离心率联系的，而从 Sommerfeld 椭圆轨道理论知道，最大离心率轨道的角动量量子数是

$$\left.\begin{aligned} l_n &= n-1 \qquad (\text{三维氢原子}), \\ l_n &= n-\frac{1}{2} \qquad (\text{二维氢原子})^{①}. \end{aligned}\right\} \tag{4.3.59}$$

重要之点是，当 n 值很大时，$e = \langle M_x \rangle \to (1-\delta^2)^{1/2}$，与 l_n 无关. 这一点对将来叠加不同 n 值（不同 l_n 值）的态得到模拟同一经典轨道（固定 e 值）的波包是重要的. 从 ψ_n^δ 的 $\langle L_z \rangle$ 值可得，$\delta = \frac{\langle L_z \rangle}{l_n}$. 当 n 大时 $\delta \to \frac{\langle L_z \rangle}{n} = (-2E_n)^{1/2}\langle L_z \rangle$，因此有

$$e = (1-\delta^2)^{1/2} = (1+2E_n\langle L_z \rangle^2)^{1/2}, \tag{4.3.60}$$

和氢原子经典轨道的离心率，即式(4.3.3)（用原子单位）

$$e = (1+2El^2)^{\frac{1}{2}}$$

相比，正好符合.

到此为止，还没有具体解出 ψ_n^δ. 将 ψ_n^δ 用氢原子本征函数 $\psi_{n,l}(\boldsymbol{r})$（式(4.3.43)）展开：

$$\psi_n^\delta(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=-l_n}^{l_n} C_{n,l}^\delta \psi_{n,l}(\boldsymbol{r}) \tag{4.3.61}$$

要求 ψ_n^δ 满足

$$(M_x + \mathrm{i}\delta M_y)\psi_n^\delta = \frac{l_n}{n}(1-\delta^2)^{1/2}\psi_n^\delta \tag{4.3.62}$$

决定了式(4.3.61)的展开系数：

$$C_{n,l}^\delta = \frac{1}{2^{l_n}}\left(\frac{(2l_n)!}{(l_n+l)!(l_n-l)!}\right)^{1/2}(1-\delta^2)^{l_n/2}\left(\frac{1+\delta}{1-\delta}\right)^{1/2}. \tag{4.3.63}$$

当 l_n 很大时，$C_{n,l}^\delta$ 可以用 l 的 Gauss 分布近似：

$$C_{n,l}^\delta \approx \left[\frac{\pi}{2}l_n(1-\delta^2)\right]^{-1/4}\exp\left[-\frac{(l-\delta l_n)^2}{l_n(1-\delta^2)}\right]. \tag{4.3.64}$$

---

① 见式(4.3.44)，此处的 l_n 是式(4.3.44)的 $n_\rho + |l|$.

$\psi_n^\delta(\boldsymbol{r})$是"相干能量本征态"能量值为$-\dfrac{1}{2n^2}$，$n$是固定值，它是$l$态的叠加以给出$\delta$参数，它的空间分布在相应离心率的Kepler轨道上有显著峰值. 图4.4画出ψ_n^δ的空间几率分布，$l_n=40$，$\delta=0.8$相应于$e=0.6$，$\langle L_z\rangle=32$. 在远日点处的峰也和经典分布相合，在此处轨道速度最小. 这还不是在运动中的波包，因为它是定态波函数.

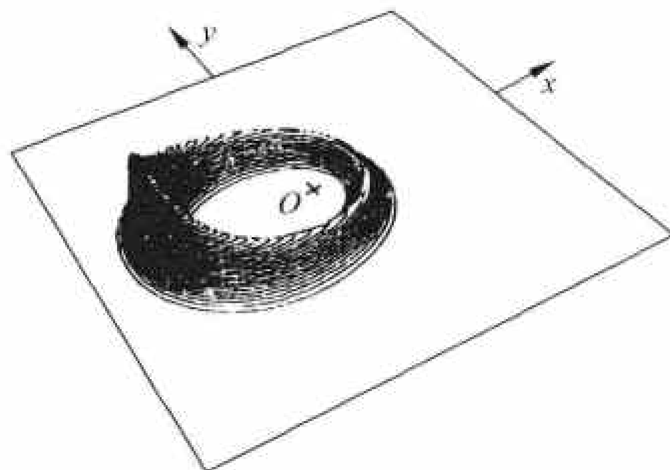


图4.4　相干能量本征态的空间几率分布. 取自[8]

要得到定域的波包，取相干能量本征态对n的线性叠加：

$$\Psi^\delta(\boldsymbol{r},t)=\sum_n a_n\psi_n^\delta(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt}.\qquad(4.3.65)$$

对系数a_n，可以取Gauss分布：

$$a_n=(2\pi\sigma^2)^{-1/4}\mathrm{e}^{-(l_n-l_0)^2/4\sigma^2}.\qquad(4.3.66)$$

在图4.5(a)，(b)中画出二维情况的波包运动(数值计算结果)：$e=0.6$，$\langle L_z\rangle=32$，$\delta=0.8$，$l_0=40$，$\sigma^2=3.0$. 图(a)相应$t=0$，图(b)相应$t=0.5T_0$(T_0为Kepler周期). 从图中看出，从近日点开始，波包变慢，收缩，到远日点处变得更陡. 当波包转回近日点时，宽度比$t=0$时增加，经过两个周期以后(图4.6)波包已经展宽得"首尾相接"了. 量子力学的干涉效应使得波包振幅在轨道上有了非均匀性的变化，出现了波包弥散、分数恢复相间以至整体恢复等量子力学固有现象.

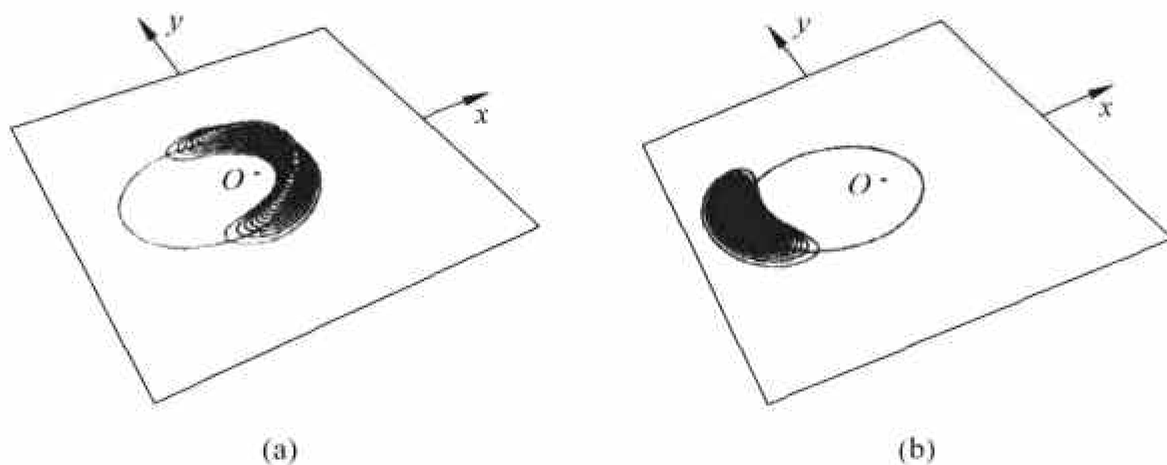


图4.5　波包的运动. 取自[8]
(a) $t=0$；　(b) $t=0.5T_0$

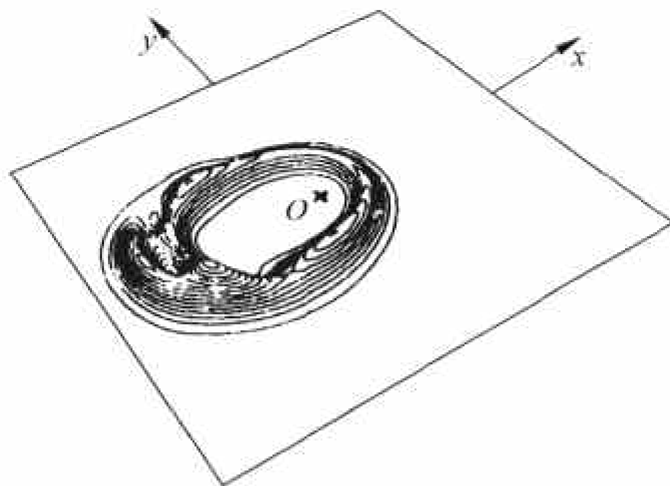


图4.6　$t=2T_0$波包变宽. 取自[8]

4.3.4 量子力学中的 Rutherford 原子

所谓 Rutherford 原子,是指当年的 Rutherford 原子模型中,电子围绕原子核作 Kepler 运动,轨道是非量子化的.有可能构造一个不扩散的量子力学波包模拟电子在原子中的 Kepler 运动吗?答案是:在一个配角的协助下这是可能的.这个配角可以是外场,或是作为第三体的另一个电子.故事要从在太阳-木星体系的稳定 Lagrange 点处围绕太阳运动的 Trojan 小行星说起.Lagrange 点是在一个局限的三体问题(太阳、一个行星以及一个质量为 m 的第三个物体——称为试验质量)中的平衡点.行星围绕太阳(或更准确地说,围绕太阳和行星的质量中心)以角频率 ω 转动.在和行星共同转动的坐标系中有平衡点,在此处太阳与行星的引力正好和离心力平衡.试验质量位于此点可以在转动系中静止,或在太阳-行星惯性系中以角频率 ω 转动.如果 Lagrange 点是稳定平衡点,试验质量可以在它附近作小振动.在转动系中,行星作用于试验质量的引力是一个常数矢量,它在惯性系中是绕太阳-行星质心以角频率 ω 转动的矢量.I. Bialynicki-Birula, M. Kalinski 和 J. H. Eberly[9,10] 提出,这样的体系可以用位于角频率 ω 的圆极化电磁场中的氢原子来实现.在 Coulomb 场和圆极化电磁场中有电子的稳定圆轨道存在,但它不是定态.在原子单位($e=m=\hbar=1$)中①,体系的 Hamilton 量是[11]:

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2} - \frac{1}{r} + \epsilon x - \omega L_z, \tag{4.3.67}$$

此处 ϵ 是电场强度,角频率 ω 的方向沿 z 轴,场的方向沿转动坐标系的 x 轴.这个 Hamilton 量的本征函数(相应本征值 $E^j(\epsilon)$)用氢原子波函数展开如下式:

$$\psi_\epsilon(r,\theta,\phi) = \sum_{nlm} c_{nlm} \mathrm{R}_{nl}(r) \mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi). \tag{4.3.68}$$

定态 Schrödinger 方程给出展开系数所满足的方程:

$$\epsilon \sum_{n'l'm'} x_{nlm}{}^{n'l'm'} c^j_{n'l'm'} = [E^j(\epsilon) - E_n + m\omega] c^j_{nlm}, \tag{4.3.69}$$

此处用 j 标志式(4.3.67)的能量本征值,$E_n = -1/2n^2$ 是氢原子的能量本征值,$x_{nlm}{}^{n'l'm'}$ 是偶极矩阵元.如在 4.2 节中讨论的,波包可以用圆 Rydberg 态 $|n, n-1, n-1\rangle$ 构造.考虑用 k 和 s 标志的多重态 $|n, n-1-k, n-1-k-s\rangle$,此处 $k \ll n, s \ll n$.偶极矩阵元的形式是已知的[12],而在条件 $k \ll n, s \ll n$ 时,不同多重态间矩阵元的值要远小于相同多重态间的值,相比之下可以忽略.此外我们集中注意在旋转坐标系中的本征函数,它们在角动量空间局限于展开式(4.3.68)中以某个值 n_0 为中心的有限数量的一些态.在上述条件下可以取所有非零的矩阵元为 $x_{nlm}{}^{n'l'm'} = n_0{}^2/2 = r_0/2$,此处 r_0 是量子数为 n_0 的 Bohr 轨道半径.n 值的局限可以允许将氢原子能量本征值在 n_0 附近展开到二阶,即有

$$E_n = -\frac{1}{2n_0{}^2} + \omega_c \delta n - \frac{3}{2}\frac{\delta n^2}{r_0^2}, \tag{4.3.70}$$

此处 $\omega_c = 1/n_0{}^3$ 是轨道 n_0 的 Kepler 频率,$\delta n = n - n_0$.本征方程式(4.3.69)化简后就是在 Fourier 空间的 Mathieu 方程.用 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta n\phi}$ 为基的位形空间方程为

① 在原子单位体系中,长度单位是 Bohr 轨道半径 $a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m_e} = 5.29 \times 10^{-11}\,\mathrm{m}$,能量单位是氢原子结合能 $\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = 13.6\,\mathrm{eV}$.其他单位均可由此导出.例如时间单位是光传播 Bohr 轨道半径所需时间,即 $1.765 \times 10^{-19}\,\mathrm{s}$.

$$\left[\frac{3}{2}\frac{1}{r_0^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\varepsilon r_0\cos\phi\right]f=[E^j(\varepsilon)-E_{n_0}+(n_0-k-s)\omega]f. \tag{4.3.71}$$

这是质量为$-1/3$的量子摆的Schrödinger方程．本征值$E^j_{ks}(\varepsilon)$对强场和弱场情况都有解析表达式[11]，量子数k和s和角动量有关，j代表量子摆的激发状态．我们不进行细节讨论，只简单给出结果．在文献[10]中作者用数值计算证实了Rydberg形状不变的波包存在．图4.7给出在惯性系中波包随时间演化的等值图．每个周期取三幅图，分别是第1,2,3,5,7,10周期．参数如下：

$$\omega=209.049\text{GHz},\quad \varepsilon=-2\,243.36\text{V/m},\quad r_0=3\,394.71\text{Bohr 半径}$$

图中显示出波包形状保持的强烈印象．这是Coulomb能谱的非线性被压制的结果．文献[11]的一个很重要的结果是：Trojan波包可以从圆轨道开始将电磁场绝热引入而得到．图4.8显示电子几率密度的角度局域化．它在$t=0$以及在6个、14个、20个以及24个周期时的4幅快照，显示了在场指数增加时角度局域化增强．初态是$n=20$的圆轨道．

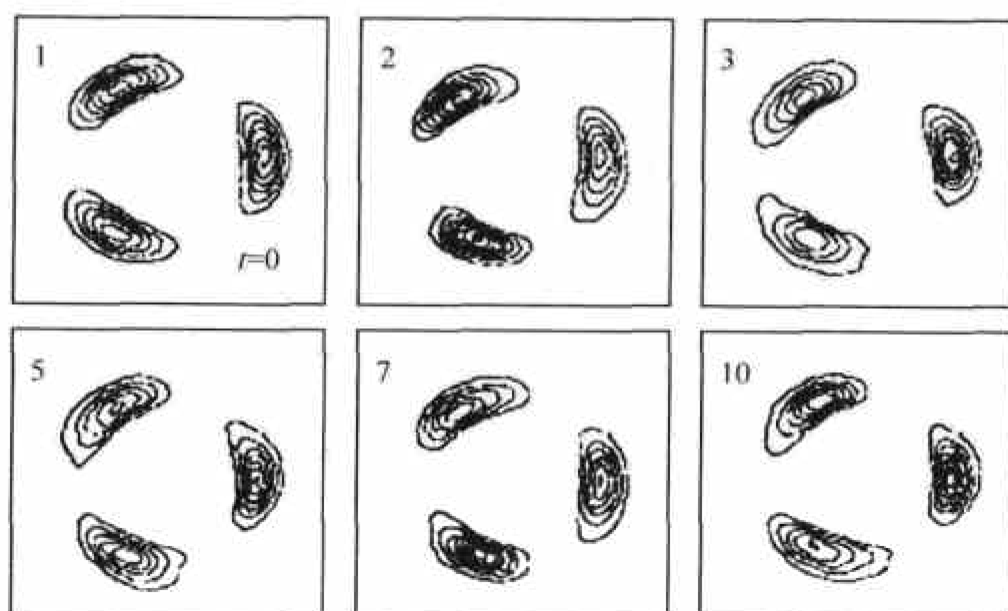


图4.7　在惯性系中波包随时间的演化．取自[10]

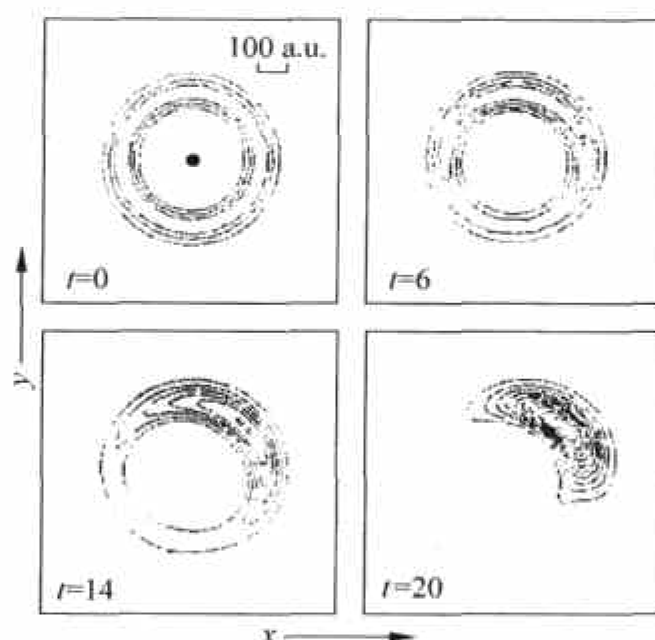


图4.8　电子几率密度的角度局域化．取自[11]

原子中电子的不扩散的波包也可以不用外场的帮助而作为Trojan小行星的模拟而实现[13,14]．在2-电子原子中两个电子非对称激发到Rydberg态：$\langle r_1\rangle\ll\langle r_2\rangle$，电子1和2分别

代表内电子和外电子. 在经典绝热模型中，外电子旋转一周时，内电子已经旋转了许多周. 时间尺度的差别允许我们在此时应用绝热近似. 外电子可感受到内电子对于 Coulomb 势的屏蔽效应，因而 $Z_{\text{eff}} \ll 1$. 外电子提供了旋转电场，可使核心（原子核和内电子）极化，使内电子的椭圆轨道进动. 两个电子的转动方向相反，内电子椭圆轨道的长轴绝热地跟随外电子，如图 4.9 所示. 2-电子原子的含时 Hartree 方程是：

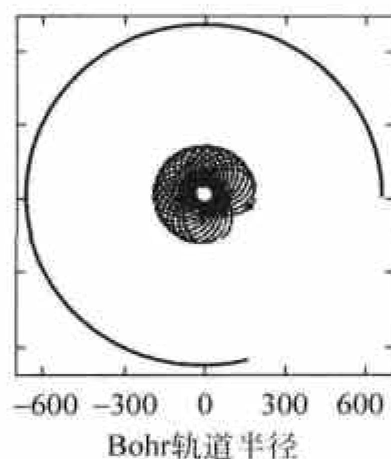


图 4.9 电子经典轨道的数值模拟，取自[14]

$$H_i\psi_i = \mathrm{i}\frac{\partial\psi_i}{\partial t}, \quad i = 1,2, \tag{4.3.72}$$

此处

$$H_i = -\frac{\nabla^2}{2} - \frac{2}{|\boldsymbol{r}|} + \int \frac{\rho_j(\boldsymbol{r},t)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}\boldsymbol{r}, \quad i \neq j \tag{4.3.73}$$

$$\rho(\boldsymbol{r},t) = \rho_1(\boldsymbol{r},t) + \rho_2(\boldsymbol{r},t) = |\psi_1(\boldsymbol{r},t)|^2 + |\psi_2(\boldsymbol{r},t)|^2. \tag{4.3.74}$$

忽略变换势（Fock 项）是安全的，两个电子相距很远，因此 $\psi_1(\boldsymbol{r})\psi_2(\boldsymbol{r})$ 对所有的点 $\boldsymbol{r}$ 都几乎为零. 这种情况允许我们在 H_1 的多极展开中对外电子保留偶极项，对内电子保留单极项. 这样 Hartree 方程就成为两个独立电子的 Schrödinger 方程：

$$H_1 = -\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{1}{|\boldsymbol{r}_1|} + \frac{\boldsymbol{d}(t)\cdot\boldsymbol{r}_1}{|\boldsymbol{r}_1|^3}, \tag{4.3.75}$$

$$H_2 = -\frac{\nabla_2^2}{2} - \frac{2}{|\boldsymbol{r}_2|} + \frac{1}{|\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{R}(t)|}, \tag{4.3.76}$$

此处

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{R}(t) &= \int \psi_1^*(\boldsymbol{r}_1,t)\boldsymbol{r}_1\psi_1(\boldsymbol{r}_1,t)\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1, \\ \boldsymbol{d}(t) &= \int \psi_2^*(\boldsymbol{r}_2,t)\boldsymbol{r}_2\psi_2(\boldsymbol{r}_2,t)\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2. \end{aligned}\right\} \tag{4.3.77}$$

对于 $\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{d}$ 以相同角频率 ω 以及同样相位转动，有

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{R}(t) &= R(\hat{\boldsymbol{x}}\cos\omega t + \hat{\boldsymbol{y}}\sin\omega t), \\ \boldsymbol{d}(t) &= d(\hat{\boldsymbol{x}}\cos\omega t + \hat{\boldsymbol{y}}\sin\omega t). \end{aligned}\right\} \tag{4.3.78}$$

将式(4.3.75)和式(4.3.76)中与时间有关的项线性化以后，耦合定态 Hartree 方程变为：

$$\left.\begin{aligned} \left[-\frac{\nabla^2}{2} - \frac{1}{|\boldsymbol{r}|} - E_1 x - \omega L_z\right]\phi_1 &= \varepsilon_1\phi_1, \\ \left[-\frac{\nabla^2}{2} - \frac{2}{|\boldsymbol{r}|} + E_2 x - \omega L_z\right]\phi_2 &= \varepsilon_2\phi_2. \end{aligned}\right\} \tag{4.3.79}$$

耦合通过 E_1 和 E_2 实现，此处 $E_1 = \frac{2d}{R^3}, E_2 = \frac{1}{R^2}$.

我们看到了两个图画的等价性，一个是借助于外场，另一个是借助第三个粒子. 我们在此不叙述波包的构成，只给出结果[14]. 两个电子与时间有关的几率密度的频闪快照示于图 4.10. 外电子处于 Trojan 波包态，$n_1 = 60$，无量纲参数 $q = 1/R^3\omega^2 = 0.9562$；内电子处于椭圆轨道，离心率 $\varepsilon = 0.25$，$n_2 = 21$. 外电子外接正方形占据空间 10 800×10 800a. u.，内电子轨道是经过放大的. 给出的时间数字以旋转周期为单位.

在实验方面，H. Meada 和 T. F. Gallagher[15] 得到了 Li 原子 Rydberg 态在微波场中的

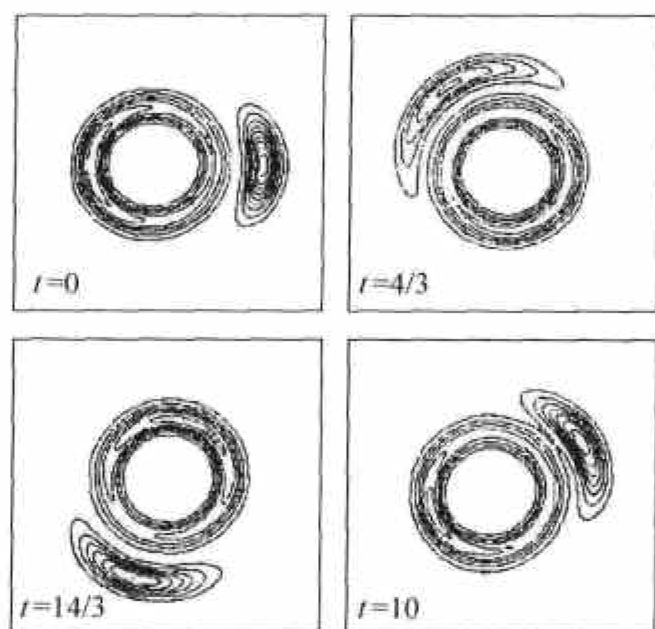


图 4.10　两个电子的几率密度随时间的演化. 取自[14]

不扩散波包. 他们还进一步将实验提高到用微波操控波包的水平[16]. 在此前的讨论中我们强调了波包形状的保持. 实际上波包的轨道是经典的，意思是轨道是非量子化的. 轨道的 Bohr 半径 r_0 和旋转角频率 ω 二者都是非量子化的，即它们能连续变化. 在实验[16]中通过在 13 到 19GHz 之间增减微波频率就能使电子的结合能和轨道大小连续变化.

氢原子的结合能是 $E_n=Ry/n^2$，此处 Ry 是 Rydberg 常数. 能级间距是 $\Delta E=-2Ry/n^3$. 设波包包含 Δn 个状态. 经典的 Kepler 频率是

$$f_K=\frac{\Delta E}{h}=\frac{2Ry}{hn^3}=6.6\times10^{15}\ \frac{1}{n^3}\text{Hz}.$$

对 $n=70$，$f_K=19.2$GHz，在微波范围. 在 x 轴方向线性极化的微波场中，最局域化的波包是当电子(和场的频率同步)运动在一个沿 x 轴具有高度离心率的轨道上实现的，如图 4.11 所示. Li 原子的价电子被激发，再用微波照射原子. 微波频率最初调谐在 Kepler 频率上，此后连续调高或调低. 微波场先将电子运动锁相，此后在连续调高或调低频率时增加或减小 Kepler 频率，同时改变轨道大小和结合能. 当频率增高(降低)时，轨道增大(减小)，结合能减小(增加). 在实验中观察到 n 的变化，并观察到在频率连续调整过程中，电子运动与微波场保持锁相. 当微波频率从 19GHz 调到 13GHz 时，最初在 $n=70$ 状态的原子转变为 $n=79$ 状态.

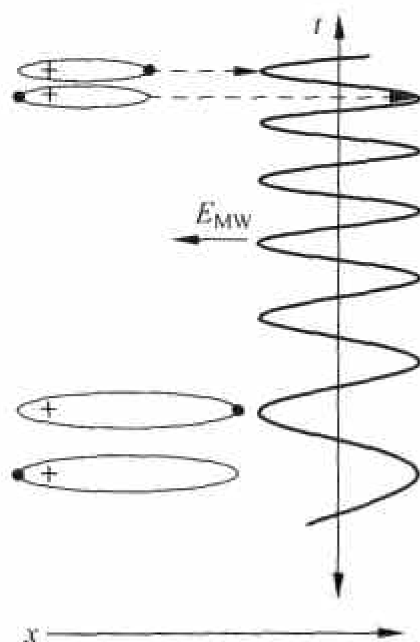


图 4.11　微波频率连续调节时电子轨道的变化. 取自[16]

进行电子轨道的操控过程如下. 用激光脉冲将 Li 原子价电子激发到 $65<n<90$，微波场最初调整到 Kepler 频率. 微波频率连续变化以及电子轨道的变化示于图 4.11. n 的变化以及锁相的持续可以从分析微波脉冲照射后的终态得到. 对原子施加直流电离场，在 1μs 时间内从 0V/cm 增到 40V/cm，过程示于图 4.12(b). 当电离场将原子一侧的势垒降得足够低时，电子就可以逸出. 高 n 态的电子比低 n 态的电子逸出的早. 场电离的电子被探测，时间分辨的场电离信号就可以用来推断终态的分布. 图 4.13 给出终态分布. 图(a)当 $n=70$ 原子被 19GHz 脉冲照射时，它们基本停留在这个状态上. 在电离场达到

27V/cm时，这个终态被电离. 当微波场变得太强（约4V/cm）时，它将原子完全电离. 图(b)当$n=79$原子被19GHz脉冲照射时，原子停留在这个状态上，这是因为微波频率和$n=79$态的Kepler频率相差太多，不易将原子状态重新分配. 原子在电离场达到18V/cm时被电离. 图(c)当$n=70$的原子被频率连续调低（从19GHz到13GHz）的脉冲照射时（微波场为0.5～1.4V/cm），原子多数从$n=70$被转移到$n=79$状态. 以上结果演示了连续变频的微波场将电子运动锁相，并将电子轨道的Kepler频率从19GHz减到13GHz，将量子数从70增到79. 锁相还可以用动量选择电离进一步证实，利用亚皮秒(sub-picosecond)半周脉冲(half cycle pulse, HCP)，图4.12. 电子轨道是沿着x轴方向高度离心的，这个方向也是微波的极化轴. HCP给予电子在$+x$方向动量转移Δp. 如果电子沿$+x$方向运动，它会得到足够能量从原子逃逸. 如果它沿$-x$方向运动，将损失能量，不发生电离. 在微波连续变频过程，不同时间分几次用HCP对原子进行照射，以验证电子动量与微波场同步. 具体分析证实了锁相的保持.

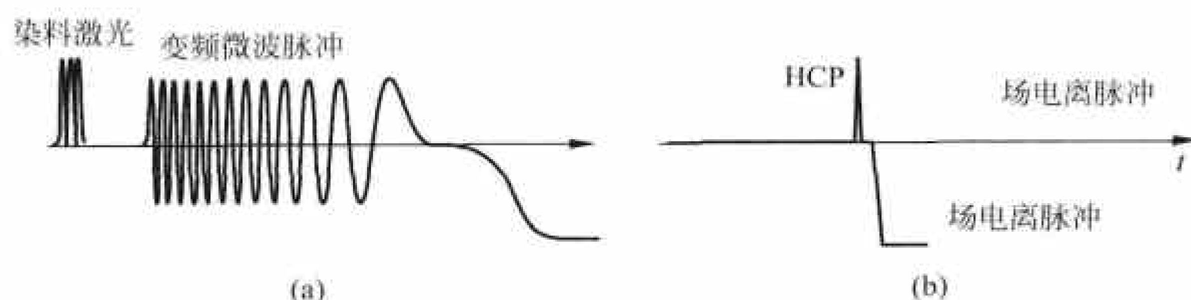


图4.12 实验中各种脉冲的时间安排. 取自[16]

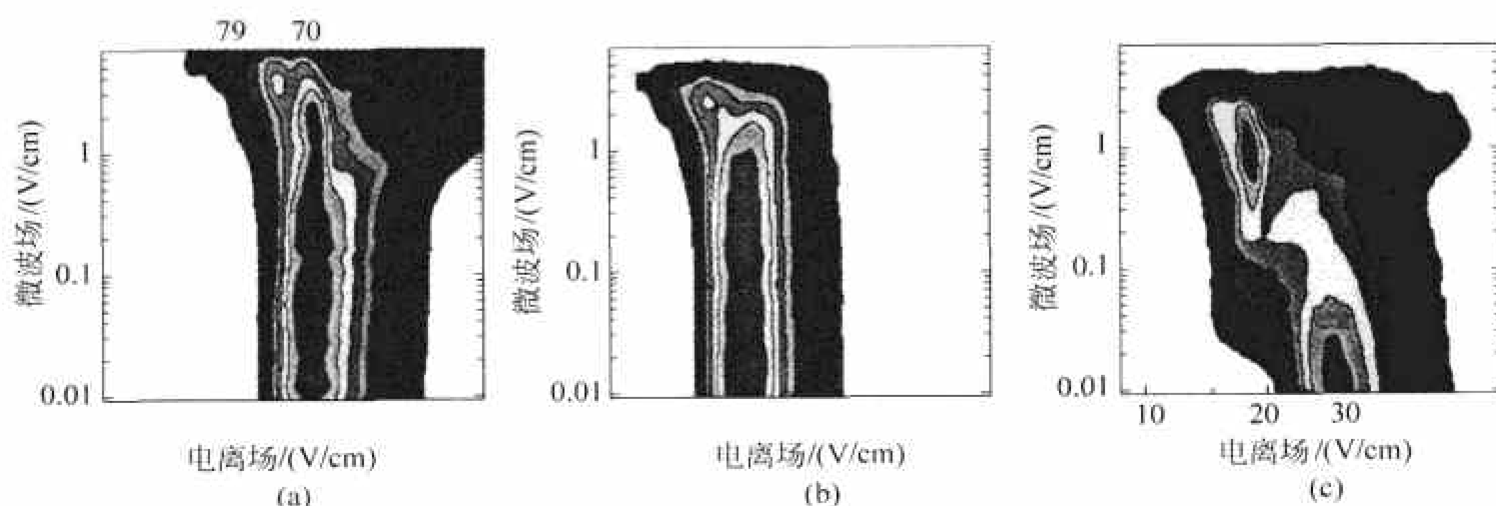


图4.13 照射微波脉冲后的终态分布. 取自[16]

4.4 波包恢复及分数恢复

Z. D. Gaeta和C. R. Stroud, Jr.[17]计算了氢原子圆轨道波包的传播、扩散、分数恢复和恢复的过程，给出了一个清楚的图像. 按L. Brown[3]的做法，把$\psi_{n,n-1,n-1}(\boldsymbol{r})$对$n$的Gauss分布叠加：

$$\Psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{(2\pi\sigma_n^2)^{1/4}}\sum_{n=1}^{\infty}\mathrm{e}^{-(n-\bar{n})^2/4\sigma_n^2}\psi_{n,n-1,n-1}(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}t/2n^2},\tag{4.4.1}$$

此处$\bar{n}$和σ_n是Gauss分布的平均值和标准偏差，仍用原子单位. 为了得到较窄和扩散较慢的波包，采取了较大的$\bar{n}$值（计算采用$\bar{n}=320$，$\sigma_n=2.5$）. 波包的传播、扩散、恢复及分数恢复都源于动力学相因子. 这在4.2节式(4.2.14)，式(4.2.24)也遇到过. 将$t/2n^2$在$\bar{n}$附近展开：

$$\frac{t}{2n^2}=\frac{t}{2\bar{n}^2}\left(1-2\frac{\Delta n}{\bar{n}}+3\left(\frac{\Delta n}{\bar{n}}\right)^2-4\left(\frac{\Delta n}{\bar{n}}\right)^3+\cdots\right),\tag{4.4.2}$$

此处$\Delta n=n-\bar{n}$. 如只取括弧中的线性质，就有（只标时间变量）

$$\Psi_{cl}(t)=\sum_{n=1}^{\infty}w_n\psi_{n,n-1,n-1}\mathrm{e}^{-2\pi i\Delta n t/T_0},\tag{4.4.3}$$

w_n 是 Gauss 分布因子,T_0 是相当$\bar{n}$的轨道经典周期,$T_0=2\pi\bar{n}^3$. 这是完全周期的"经典"波函数. 波包在 $0\leqslant t\leqslant T_0$ 的传播情况示于图 4.14. 由二阶项造成的波包扩展由式(4.4.19)给出. 用式(4.2.25)$T_{rev}=\frac{\bar{n}}{3}T_0$,$T_{rev}$是恢复时间,可将式(4.2.19)改写为

$$[\Delta\phi(t)]^2=[\Delta\phi(0)]^2+\frac{\pi^2}{[\Delta\phi(0)]^2}\left(\frac{t}{T_{rev}}\right)^2.\tag{4.4.4}$$

当上式右方等于 $\pi^2/3$(随机变量在图上均匀分布时的方差)时波包就扩展到整个圆轨道. 对现在的情况,这个弥散时间记为 T_{sp},且

$$T_{sp}=T_{rev}/8.713=12.2T_0.$$

图 4.15 画出波包扩展到整个圆轨道的情况,从此波包首尾相接出现了量子力学特征的干涉现象. 波包恢复已在 4.2 节讨论过. I. Sh. Averbuch 和 N. F. Perelman[18] 给出了部分恢复的条件,在任何时间 $t=\frac{k_1}{k_2}T_{rev}$(k_1 与 k_2 互为质数)都可以发生分数恢复. 在分数恢复时波包分裂成 K 个几乎相同的小波包:

$$\Psi(t)=\sum_{k=0}^{K-1}a_k\Psi_{cl}\left(t+\frac{kT_0}{K}\right),\tag{4.4.5}$$

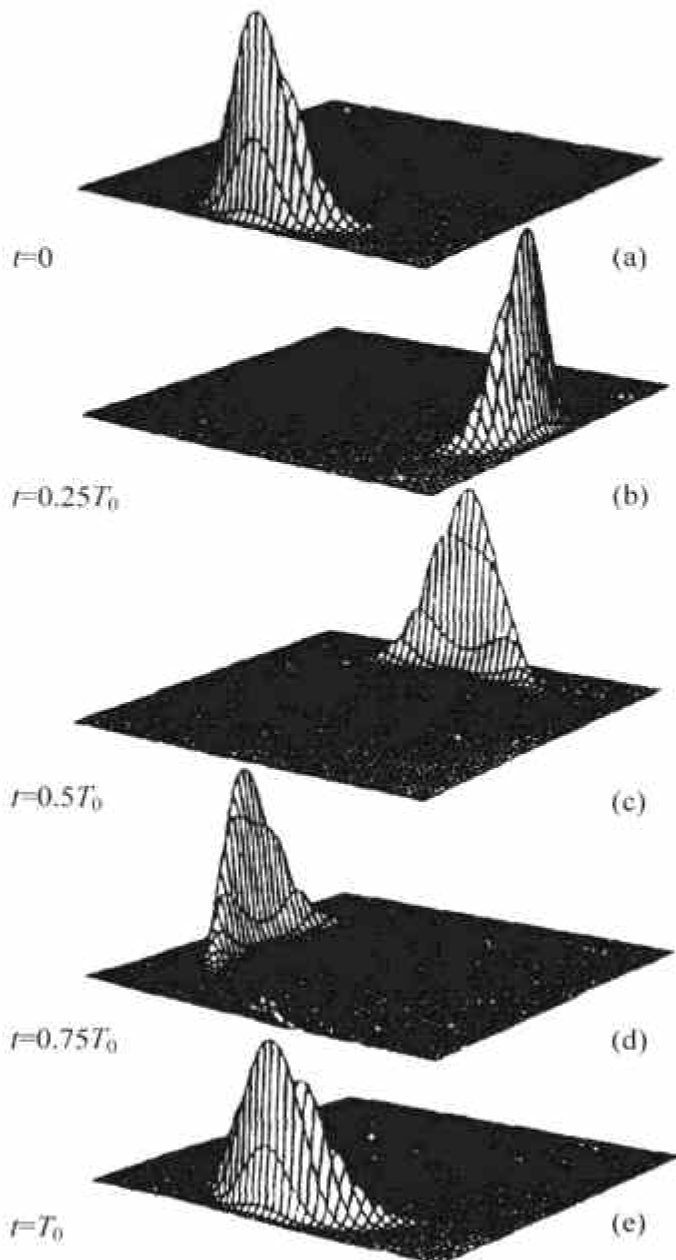


图 4.14　波包在初期演化阶段($t\leqslant T_0$). 取自[17]

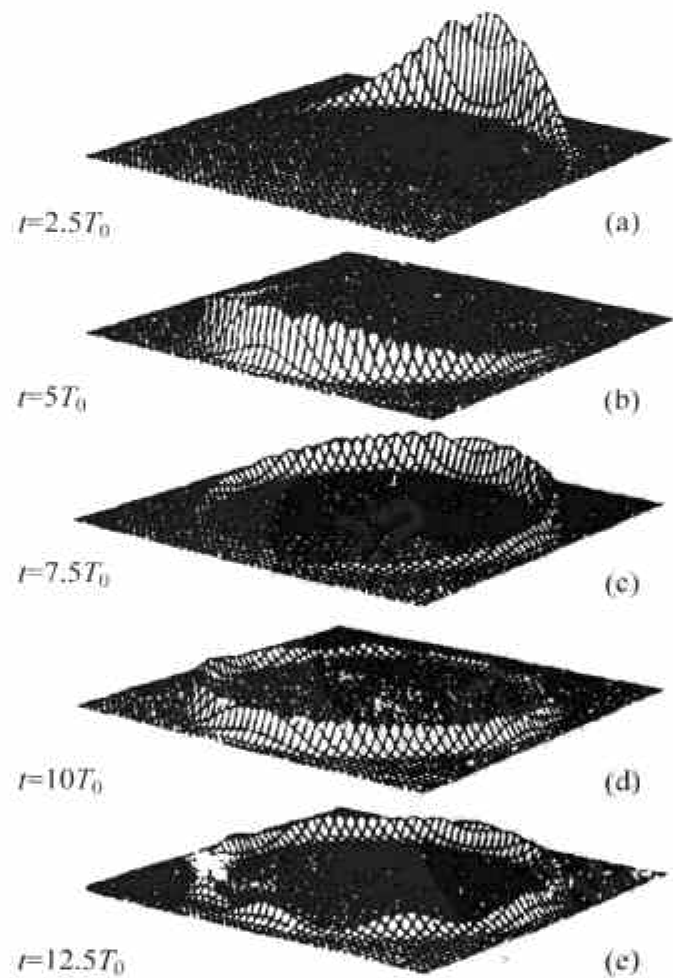


图 4.15　波包扩展到整个圆轨道. 取自[17]

a_k 是相因子，ψ_{cl} 定义见式(4.4.3). 图 4.16 画出 $K=2,3,4,5,6,7$ 的分数恢复以及完全恢复的情况，注明了发生的时间. 如 K 值过大分数恢复将不明显.

在实验方面 J. A. Yeazell 和 C. R. Stroud, Jr.[19] 首先观测到在角度上定域的波包，并观测到分数恢复. 径向波包实验上发现较早. G. Alber, H. Ritsch 和 P. Zoller[20] 用时间延迟法二光子实验(一个光子激发原子到 Rydberg 态，第二个光子进行探测)测到径向波包，也发现了分数恢复现象.

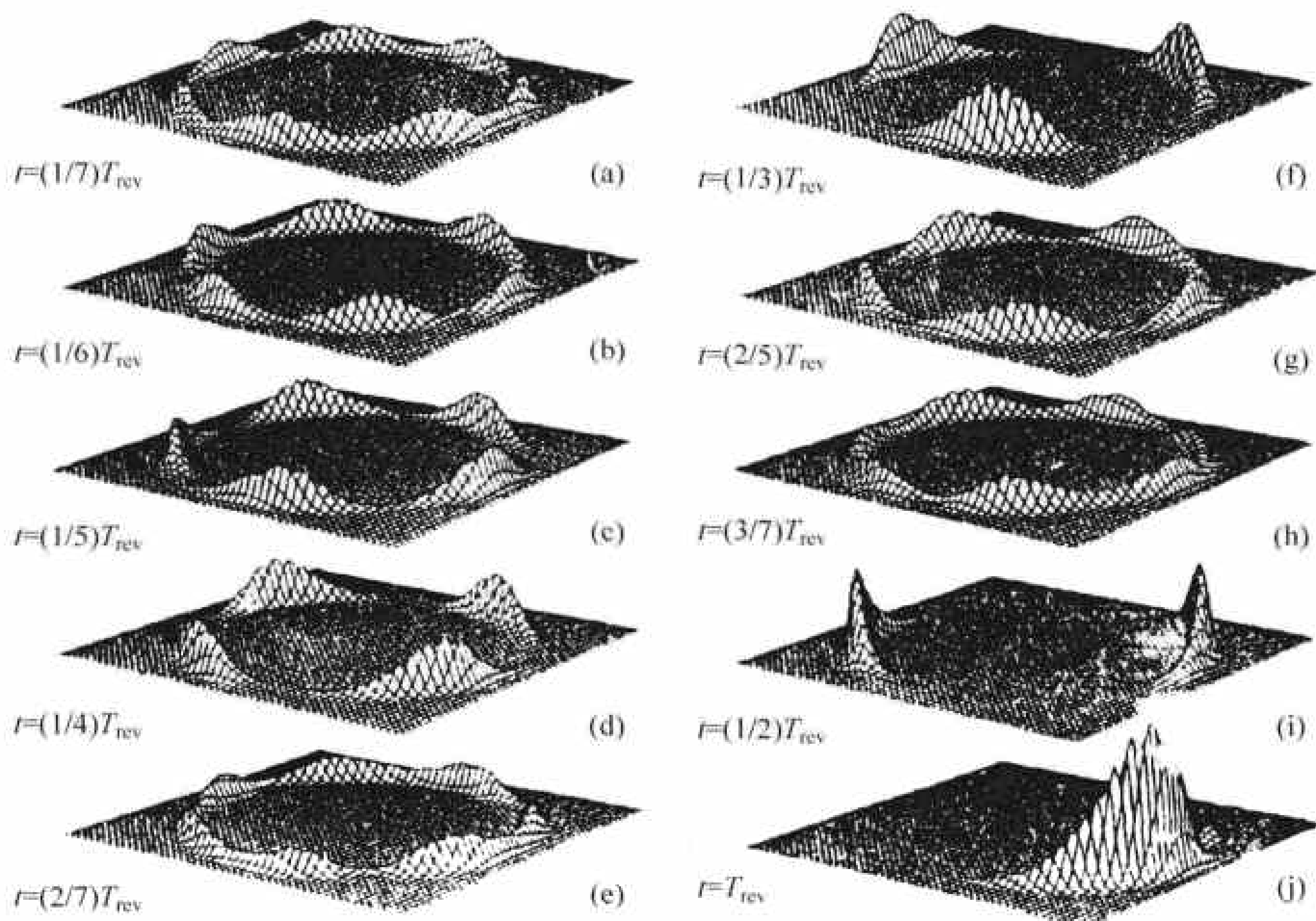


图 4.16 波包的分数恢复. 取自[18]

由 Rydberg 态波函数所构成的 Kepler 轨道波包显示出许多经典性质，但它本质上是量子力学的. 经典性质在波包弥散前($t<T_{sp}$)以及在波包恢复时($t=T_{rev}$ 以及此后的高阶恢复)是明显的. 它表现为一个定域波包沿 Kepler 轨道传播. 弥散和分数恢复时是量子行为的体现. 波包恢复所占据的时间之于整个波包运动时间就像有理数嵌入在实数中一样.

在 Schrödinger 提出相干态是经典粒子运动的量子力学对应时，对量子力学的诠释问题还没有解决. 当时物理学家曾寄希望于任何量子体系都能找到与经典轨道的对应. 当量子力学诠释问题解决之后，这方面的努力就中止了. 以上轨道波包的讨论有助于阐明经典性质的体现及其局限.

4.5 态叠加原理与量子退相干

最突出地表明量子物理与经典物理不同的是态叠加原理. 由于 Schrödinger 方程是线性的，量子体系的波函数在最一般的初始条件下会演化为 Hamilton 量本征态的相干叠加. 取最简单的二能级体系为例，在任意时间，波函数可以写作

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2, \tag{4.5.1}$$

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \tag{4.5.2}$$

对体系的状态进行测量，结果是 ψ_1（几率 $|c_1|^2$）或 ψ_2（几率 $|c_2|^2$）. 状态 ψ 用密度矩阵 ρ 表示，是

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = |c_1|^2|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + c_1c_2^*|\psi_1\rangle\langle\psi_2| + c_2c_1^*|\psi_2\rangle\langle\psi_1| + |c_2|^2|\psi_2\rangle\langle\psi_2|. \tag{4.5.3}$$

测量改变了体系的状态，从状态 ψ 变成了混合态，它的密度矩阵是

$$\rho_m = |c_1|^2|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |c_2|^2|\psi_2\rangle\langle\psi_2|. \tag{4.5.4}$$

用矩阵形式表示，则有

$$\rho = \begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1c_2^* \\ c_1^*c_2 & |c_2|^2 \end{pmatrix}, \tag{4.5.5}$$

$$\rho_m = \begin{pmatrix} |c_1|^2 & 0 \\ 0 & |c_2|^2 \end{pmatrix}. \tag{4.5.6}$$

在测量过程中非对角元消失，这称为波函数的编缩. 纯态与混合态的区别在于叠加的态间的相对相位（出现于 ρ 的非对角元）. 在电子通过双缝的衍射过程中，双缝后面的波函数由式(4.5.1)给出，两项的相干给出干涉条纹. 如果在缝后面放置计数器企图确定电子从哪个缝通过，则式(4.5.5)的非对角元，还有干涉图样一并消失.

在经典物理中，体系的演化不会有相干叠加出现. 由于某些原因，例如初始条件的不确定，对体系状态的预言可以有几率的论断. 但那是类似式(4.5.6)混合态的预言，而不可能有两个态的相干叠加，如式(4.5.5). 问题是，如果认为量子力学是普遍的，它对于宏观体系也应成立，态的叠加也不例外. 什么原因使得密度矩阵的非对角元消失呢？在量子力学初创时期这就是 Schrödinger 猫问题. 他描述了一个"魔鬼的盒子"，其中有一个放射源，它在一小时后有 50%几率衰变. 如果它衰变，放出的辐射将会启动一个装置放出剧毒物质，关闭在盒中的猫就一定中毒而死. 放射源的衰变服从量子力学规律，因此一小时后它的状态是 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$，此处 $|\uparrow\rangle$ 代表未衰变的状态，$|\downarrow\rangle$ 代表衰变了的状态. 以 $|\smile\rangle$ 和 $|\frown\rangle$ 分别代表活猫和死猫. 一小时后总体系的状态就是

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\smile\rangle|\uparrow\rangle + |\frown\rangle|\downarrow\rangle). \tag{4.5.7}$$

Schrödinger 巧妙地把量子体系（核）的叠加和宏观的猫的生与死缠绕在一起：猫就成为活猫和死猫的叠加. 式(4.5.7)不仅表明猫的生、死几率各为 50%，这在经典物理是可以接受的；它同时还显示了活猫和死猫的相干叠加，这是经典物理中从未出现过的. 是什么机制把这个相干去掉的呢？从量子力学（可能状态的相干叠加）到经典力学（允许不同的可能状态，但它们是互相排斥的）的过渡是从量子力学初创时期开始的一个热烈争辩问题.

N. Bohr 给出第一个解释. 他认为应在量子领域和经典领域间明显划出界线. 进行测量时用的仪器是经典的，因此应使用经典定律. Bohr 自己也知道不存在一个很固定的界限，因为仪器本身也可以作为量子体系，而被另一个经典仪器所测量. 这个解释在物理上不能令人满意，因为宏观物体的组成部分都是服从量子力学规律的. 在适当的条件下，它们的集合体所满足的经典规律应该能从其基础——量子力学规律——自然得出. 此外也不能把宏观和

经典，微观和量子等同起来. 因此问题归结为：量子理论是普遍的，它本身应能解释量子系统各种可能状态的叠加，如何能在测量过程中实现这些可能状态的其中之一. 近年来各种观点趋于一致：和环境的相互作用导致退相干(decoherence)，它使纯态转变为混合态. 根据量子力学，一个宏观体系状态一般地也是若干宏观状态的线性叠加. 由于和环境的相互作用，部分关于叠加的信息(即在密度矩阵非对角元中包含的部分)要泄漏给环境. 泄漏的速率应依赖于体系的大小，或两个粒子间的距离. 对于宏观体系，这个速率应该非常大，以致退相干可以“即刻”完成. 退相干完成后，密度矩阵仅有对角元，即体系处于混合态. 在如何实现退相干方面，还有不同的模型或理论. 下面的讨论基于 W. Zurek 的研究[21,22,23]. 和 N. Bohr 不同，J. von Neumann 在 1932 年[24]提出，仪器的行为也遵守量子力学规律，Zurek 采用了这个观点. 考虑体系 S，它的 Hilbert 空间由正交归一态 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$ 所张成. 也可以采取其他的基：

$$\left.\begin{aligned}|\oplus\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle],\\ |\otimes\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle];\end{aligned}\right\} \tag{4.5.8}$$

或

$$\left.\begin{aligned}|\rightarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\rangle + \mathrm{i}|\downarrow\rangle],\\ |\leftarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\rangle - \mathrm{i}|\downarrow\rangle].\end{aligned}\right\} \tag{4.5.9}$$

如果 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$ 是 σ_z 的本征矢，则 $|\oplus\rangle$ 和 $|\otimes\rangle$ 是 σ_x 的本征矢，$|\rightarrow\rangle$ 和 $|\leftarrow\rangle$ 是 σ_y 的本征矢. 探测器的 Hilbert 空间由 $|\smile\rangle$ 和 $|\frown\rangle$ 张成. 替代的基有

$$\left.\begin{aligned}|+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\smile\rangle + |\frown\rangle],\\ |-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\smile\rangle - |\frown\rangle];\end{aligned}\right\} \tag{4.5.10}$$

或

$$\left.\begin{aligned}|\wedge\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\smile\rangle + \mathrm{i}|\frown\rangle],\\ |\vee\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\smile\rangle - \mathrm{i}|\frown\rangle].\end{aligned}\right\} \tag{4.5.11}$$

体系和探测器本身的 Hamilton 量在测量过程中不起重要作用①，它们之间由相互作用耦合：

$$\begin{aligned}H^{\mathrm{SD}} &= g[|\wedge\rangle\langle\wedge| - |\vee\rangle\langle\vee|] \otimes [|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|]\\ &\equiv gH.\end{aligned} \tag{4.5.12}$$

SD 意为体系与探测器相互作用，g 是耦合常数. 直积号$\otimes$后面的算符作用于体系的状态，前面的算符作用于探测器的状态. 可以算出

① 这是一个理想化的模型，目的是探讨去相干机制，并非要算出具体的体系及探测器的演化. 模型的结果可以为更现实的情况提供引导，4.6 节最后有这个问题的讨论.

$$(H^{SD})^2 = g^2 H^2 = g^2[|\wedge\rangle\langle\wedge| + |\vee\rangle\langle\vee|] \otimes [|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|]$$
$$= g^2 I_D \otimes I_S \equiv g^2 I, \tag{4.5.13}$$

此处 I 是单位算符,计算中利用了基的正交和完全性质.体系和探测器的复合体的演化算符是(用式(4.5.13))

$$\exp\left(-\mathrm{i}\frac{H^{SD}}{\hbar}t\right) = \exp\left(-\mathrm{i}\frac{g}{\hbar}tH\right) = \left(\cos\frac{g}{\hbar}t\right)I - \mathrm{i}\left(\sin\frac{g}{\hbar}t\right)H. \tag{4.5.14}$$

根据式(4.5.12),有

$$H = -\mathrm{i}[|\smile\rangle\langle\frown| + |\frown\rangle\langle\smile|] \otimes [|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|]$$

令复合体从 $t=0$ 开始演化:

$$|\Psi(t=0)\rangle = [a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle] \otimes |\smile\rangle, \tag{4.5.15}$$

有

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left(-\mathrm{i}\frac{g}{\hbar}tH\right)|\Psi(0)\rangle = \cos\frac{g}{\hbar}t[a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle] \otimes |\smile\rangle -$$
$$\sin\frac{g}{\hbar}t[a|\uparrow\rangle - b|\downarrow\rangle] \otimes |\frown\rangle. \tag{4.5.16}$$

为了看到演化的结果,在上式中代入 $t=\pi\hbar/4g$,得

$$\left|\Psi\left(t=\frac{\pi\hbar}{4g}\right)\right\rangle = a|\uparrow\rangle \otimes |-\rangle + b|\downarrow\rangle \otimes |+\rangle. \tag{4.5.17}$$

在体系和探测器间的相互作用所带来的幺正演化导致它们状态间的关联!但幺正演化并不能解决测量问题,因为如果代入二倍的时间就有

$$\left|\Psi\left(t=\frac{\pi\hbar}{2g}\right)\right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}[a|\uparrow\rangle - b|\downarrow\rangle] \otimes |\frown\rangle, \tag{4.5.18}$$

关联又不见了.如代入三倍时间,有

$$\left|\Psi\left(t=\frac{3\pi\hbar}{4g}\right)\right\rangle = -[a|\uparrow\rangle \otimes |+\rangle + b|\downarrow\rangle \otimes |-\rangle]. \tag{4.5.19}$$

关联和式(4.5.17)正好相反!仔细想一下倒也没有什么奇怪,因为幺正演化算符式(4.5.14)本来是时间的周期函数.此外还有问题,探测器知道它该测什么量吗?从式(4.5.17)看,它像是测的 $|\uparrow\rangle$ 或 $|\downarrow\rangle$,但可以把式(4.5.17)改写为

$$\left|\Psi\left(t=\frac{\pi\hbar}{4g}\right)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle] \otimes |\smile\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}[a|\uparrow\rangle - b|\downarrow\rangle] \otimes |\frown\rangle, \tag{4.5.20}$$

对 $a=b=\frac{1}{\sqrt{2}}$,它是

$$\left|\Psi\left(t=\frac{\pi\hbar}{4g}\right)\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\oplus\rangle \otimes |\smile\rangle - |\otimes\rangle \otimes |\frown\rangle], \tag{4.5.21}$$

探测器和体系的 $|\oplus\rangle$ 和 $|\otimes\rangle$ 发生了关联,即探测器测的是 $|\oplus\rangle$ 和 $|\otimes\rangle$,这说明连如何选基函数都不确定.它正是量子关联的特点.为了强调量子关联和经典关联的区别,J. A. Wheeler[25] 举了一个例子.将一个硬币一劈为二,一个带有正面 $|h\rangle$,一个带有反面 $|t\rangle$.将它们各装入一个信封,送交距离任意远的两个观测者.这里选择观测什么是肯定的:正面或反面,而且两个观测的结果是相互关联的.这个经典关联情况可以用混合态的密度矩阵表示:

$$\rho = \frac{1}{\sqrt{2}}[|h_1\rangle\langle h_1||t_2\rangle\langle t_2|+|t_1\rangle\langle t_1||h_2\rangle\langle h_2|]. \tag{4.5.22}$$

量子关联的选择(测量什么)都是不确定的.作为量子关联的特点,在测量之前不仅两个自旋状态是未知的(这点和经典关联类似),甚至连状态都是未定的(究竟是 S_x 的,S_y 的还是 S_z 的本征态).这正是量子力学的特征.这个状况是 EPR 佯谬的 Bohm 版本(本书 1.7 节).von Neumann 了解这个问题,因此他引入了非幺正的态矢量(波函数)的编缩.纯态(见式(4.5.17))的密度矩阵是

$$\begin{aligned}\rho^c = &|a|^2|\uparrow\rangle\langle\uparrow||-\rangle\langle-|+ab^*|\uparrow\rangle\langle\downarrow||-\rangle\langle+| \\ &+a*b|\downarrow\rangle\langle\uparrow||+\rangle\langle-|+|b|^2||\downarrow\rangle\langle\downarrow||+\rangle\langle+|.\end{aligned} \tag{4.5.23}$$

态矢编缩的结果是非对角元的消失,从而得到混合态的约化密度矩阵 ρ^r:

$$\rho^c \to \rho^r = |a|^2\uparrow\rangle\langle\uparrow||-\rangle\langle-|+|b|^2|\downarrow\rangle\langle\downarrow||+\rangle\langle+|. \tag{4.5.24}$$

这样对角元的系数 $|a|^2$ 和 $|b|^2$ 可以给以经典解释:它们是出现 $|\uparrow\rangle$ 与 $|\downarrow\rangle$ 的几率.放弃存储在非对角元中的信息,换来的收获是测量的选择已经确定:是 $|\uparrow\rangle$ 或 $|\downarrow\rangle$ 而非 $|\oplus\rangle$ 或 $|\otimes\rangle$.如果将对应式(4.5.22)的密度矩阵的非对角元去掉,选择的便是 $|\oplus\rangle$ 和 $|\otimes\rangle$.

von Neumann 的"非幺正过程"是外加的,并非量子理论本身的结果.量子退相干的原因应是宏观体系与环境的相互作用.

4.6 与环境的相互作用导致退相干

宏观量子系统永不能与其环境隔绝.考虑环境 E,它也是量子体系,与体系 S 及探测器 D 相互作用.它可以是仪器的一部分,具有许多自由度.它的作用是吸收密度矩阵非对角元所包含的信息从而导致波函数编缩,在而确定被测量的可观测量(称为指针可观测量(pointer observable))及其本征态(称指针基(pointer basis)).以下先作一般讨论,然后讨论具体模型.SDE 复合体演化如下:

$$|\Phi(t=0)\rangle = |\psi\rangle \otimes |D_0\rangle \otimes |E(t=0)\rangle, \tag{4.6.1}$$

这是 $t=0$ 时的复合体状态.直积号隔开的依次是体系、探测器和环境的状态.由于体系和探测器相互作用,它们的复合体演化到 t_1,产生了一定的关联.在此以前环境相互作用尚未启动:

$$|\Phi(t=t_1)\rangle = \left\{\sum_n c_n|n\rangle \otimes |D_n\rangle\right\} \otimes |E(t_1)\rangle. \tag{4.6.2}$$

根据上一节的讨论,此时指针观测量尚未确定.在上式中花括弧内的体系-探测器状态也可以用其他的基展开.环境与探测器相互作用从 t_1 开始投入,到 $t=t_2$ 复合体状态演化为

$$|\Phi(t=t_2)\rangle = \sum_n c_n|n\rangle \otimes |D_n\rangle \otimes |E_n(t_2)\rangle, \tag{4.6.3}$$

环境与体系、探测器建立了关联,也就确定了指针基 $|n\rangle$.这是由 ED 相互作用所选定的.环境与探测关联的建立是以部分体系-探测器关联的损失为代价的.因此此时体系-探测器复合体已经不能随意建立除 $|n\rangle$ 与 $|D_n\rangle$ 以外的其他关联.这是环境重要作用之一.以下环境的作用是把体系-探测器状态从纯态转化为混合态,即使非对角元衰减.但在这样做以前先要确定把什么基放在对角元上.对环境不作测量,因此在求 $t>t_2$ 时的约化密度矩阵时要对环境求迹:

$$\begin{aligned}\rho &= \mathrm{tr}_{\mathrm{E}} \mid \Phi(t > t_2)\rangle\langle\Phi(t > t_2) \mid \\ &= \sum_{m,n} c_n c_m^* \mid D_n\rangle\langle D_m \mid \otimes \mid n\rangle\langle m \mid \otimes \mathrm{tr}_{\mathrm{E}} \mid E_n(t)\rangle\langle E_m(t) \mid.\end{aligned} \tag{4.6.4}$$

下面将采用简单的可解模型演示在 t 足够大时 $\mathrm{tr}_{\mathrm{E}}|E_n(t)\rangle\langle E_m(t)| = \langle E_m(t)|E_n(t)\rangle$ 以指数趋近 δ_{nm},即 ρ 的非对角元指数衰减:指针可观测量的各本征态间的相干随时间衰减,使系统进入指针可观测量的任何一个本征态而不是它们的叠加,从而完成退相干:

$$\rho \approx \sum_n \mid c_n \mid^2 \mid D_n\rangle\langle D_n \mid \otimes \mid n\rangle\langle n \mid. \tag{4.6.5}$$

SD 复合体处于混合态.它可以是 $|n\rangle\otimes|D_n\rangle$ 的任何态,几乎为 $|c_n|^2$,但不同 n 的态是独立的,态叠加消失了.退相干就是这样出现的.

环境含有大量(N)二能级体系.其中第 k 个占据 $|\smile)_k$ 态或 $|\frown)_k$ 态,此处圆弧和下标用于标明环境状态.环境原子间没有相互作用,它也没有自己的 Hamilton 量.环境与探测器相互作用的 Hamilton 量为

$$H^{\mathrm{DE}} = \sum_n H_k^{\mathrm{DE}}, \tag{4.6.6}$$

此处

$$H_k^{\mathrm{DE}} = g_k[\mid \smile\rangle\langle\smile \mid - \mid \frown\rangle\langle\frown \mid] \otimes [\mid \smile)(\smile \mid - \mid \frown)(\frown \mid]_k \otimes \prod_{j\neq k} 1_j. \tag{4.6.7}$$

从式(4.6.7)可以看到,H_k^{DE} 的本征态是探测器的任何状态 $|\smile\rangle$ 或 $|\frown\rangle$ 与任一个环境原子 k 的任何状态 $|\smile\rangle_k$ 或 $|\frown\rangle_k$ 的直积,本征值是 $\pm g_k$.令 $t=0$ 代表 DE 相互作用开始起作用的时间,而此时 S 与 D 已经有了关联:

$$\mid \Phi(0)\rangle = [a \mid \uparrow\rangle \otimes \mid \smile\rangle + b \mid \downarrow\rangle \otimes \mid \frown\rangle] \prod_{k=1}^{N} \otimes [\alpha_k \mid \smile)_k + \beta_k \mid \frown)_k]. \tag{4.6.8}$$

由于探测器状态和环境原子状态的直积是 H^{DE} 的本征态,因此在 H^{DE} 作用下 $|\Phi(0)\rangle$ 演化到时间 t 变为

$$\begin{aligned}\mid \Phi(t)\rangle = a \mid \uparrow\rangle \otimes \mid \smile\rangle \prod_{k=1}^{N} \otimes [\alpha_k \mathrm{e}^{-\mathrm{i}g_k t/\hbar} \mid \smile)_k + \beta_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}g_k t/\hbar} \mid \frown)_k] \\ + b \mid \downarrow\rangle \otimes \mid \frown\rangle \prod_{k=1}^{N} \otimes [\alpha_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}g_k t/\hbar} \mid \smile)_k + \beta_k \mathrm{e}^{-\mathrm{i}g_k t/\hbar} \mid \frown)_k].\end{aligned} \tag{4.6.9}$$

将环境态缩写

$$\begin{aligned}\mid E_{|\smile\rangle}(t)\rangle &\equiv \prod_{k=1}^{N} \otimes [\alpha_k \mathrm{e}^{-\mathrm{i}g_k t/\hbar} \mid \smile)_k + \beta_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}g_k t/\hbar} \mid \frown)_k], \\ \mid E_{|\frown\rangle}(t)\rangle &\equiv \prod_{k=1}^{N} \otimes [\alpha_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}g_k t/\hbar} \mid \smile)_k + \beta_k \mathrm{e}^{-\mathrm{i}g_k t/\hbar} \mid \frown)_k],\end{aligned} \tag{4.6.10}$$

此处 E 的下标 $|\smile\rangle$ 和 $|\frown\rangle$ 标明它们和探测器状态的关联(因此用尖括弧表示).式(4.6.9)变为

$$\mid \Phi(t)\rangle = a \mid \uparrow\rangle \otimes \mid \smile\rangle \otimes \mid E_{|\smile\rangle}(t)\rangle + b \mid \downarrow\rangle \otimes \mid \frown\rangle \otimes \mid E_{|\frown\rangle}(t)\rangle. \tag{4.6.11}$$

从 $\Phi(0)$ 演化到 $\Phi(t)$ 确立了指针可观测量算符

$$\hat{\Lambda} = \lambda_1 \mid \smile\rangle\langle\smile \mid + \lambda_2 \mid \frown\rangle\langle\frown \mid, \tag{4.6.12}$$

λ_1, λ_2 为实数. 实际上 $|\smile\rangle$ 和 $|\frown\rangle$ 就是进入 H^{DE} 的探测器状态，即进入 H^{DE} 的状态将成为指针基. 虽然在 $t=0$ 时体系-探测器复合体也可以用其他基表示，环境却在各种可能的基中选中了 $|\smile\rangle$ 和 $|\frown\rangle$. 体系-探测器复合体的约化密度矩阵是

$$\begin{aligned}\rho^{SD} &= \mathrm{tr}_E \mid \Phi(t)\rangle\langle\Phi(t) \mid \\ &= |a|^2 \mid \uparrow\rangle\langle\uparrow \mid \otimes \mid \smile\rangle\langle\smile \mid + z(t)ab^* \mid \uparrow\rangle\langle\downarrow \mid \otimes \mid \smile\rangle\langle\frown \mid \\ &\quad + z^*(t)a^*b \mid \downarrow\rangle\langle\uparrow \mid \otimes \mid \frown\rangle\langle\smile \mid + |b|^2 \mid \downarrow\rangle\langle\downarrow \mid \otimes \mid \frown\rangle\langle\frown \mid,\end{aligned} \tag{4.6.13}$$

此处

$$z(t) = \langle E_{|\smile\rangle}(t) \mid E_{|\frown\rangle}(t)\rangle = \prod_{k=1}^{N}[\cos(2g_k t/\hbar) - \mathrm{i}(|\alpha_k|^2 - |\beta_k|^2)\sin(2g_k t/\hbar)]. \tag{4.6.14}$$

关联振幅 $z(t)$ 在退相干过程中起决定性作用，它的性质如下：

$$z(0) = 1, \tag{4.6.15}$$

$$|z(t)|^2 \leqslant 1, \tag{4.6.16}$$

$$\langle z(t)\rangle = \lim_{T\to\infty} T^{-1}\int_0^T z(t)\mathrm{d}t = 0, \tag{4.6.17}$$

$$\langle |z(t)|^2\rangle = 2^{-N}\prod[1 + (|\alpha_k|^2 - |\beta_k|^2)^2]. \tag{4.6.18}$$

式(4.6.18)表明，除非环境的初始状态与 Hamilton 量的一个本征态组合(即对所有的 k，有 α_k, β_k，其中之一为 0，而另一个模为 1)，否则 $|z(t)|^2$ 的期望值远小于 1. 图 4.17 给出关联振幅 $z(t)$ 作为 t 的函数，由式(4.6.14)给出，$|\alpha_k| = |\beta_k|$，即 $z(t) = \prod \cos 2g_k t/\hbar$. 图 4.17(a) 取 $N=5$，图(b)取 $N=10$，图(c)取 $N=15$. g_k 的值从(0,1)区间随机选出. 从结果可以看到 $N=15$ 时这个数不大，但对退相干的效果已很显著，且增加 N 的效果是明显的. 在热力学极限 $N\to\infty$，H^{DE} 变为不可逆的. 它通过建立环境-探测器关联确立了指针基并编缩态矢. 在以上的模型中，体系、探测器、环境都遵守量子力学规律，复合体及各部分的演化都是由有关的 Hamilton 量决定的. 指针基的出现是动力学演化(关联建立)的结果，没有外加的非幺正过程. 指针态间的相干之所以衰减，是由于与多自由度的环境相互作用的结果. 关联振幅也会像统计力学中的物理量一样，会有涨落与 Poincaré 复现. 将模型讨论的机制用于一般量子体系以及关联的衰减、涨落、复现，在文献[21]中有进一步的讨论.

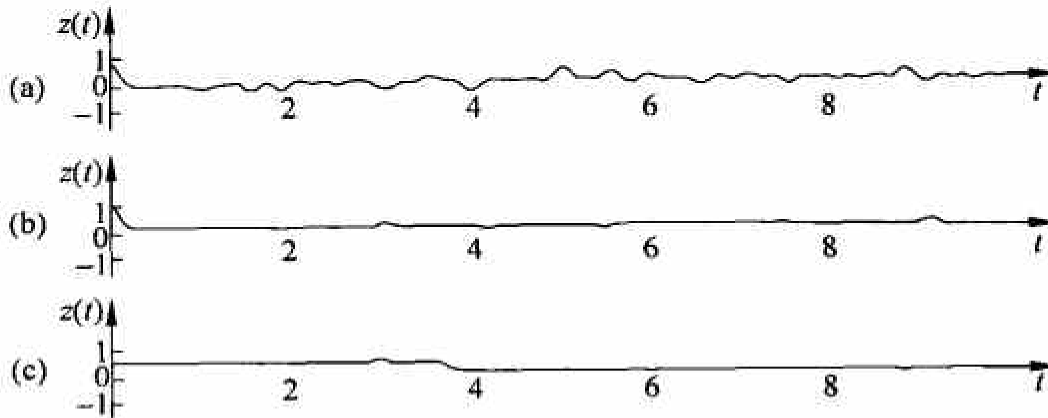


图 4.17 关联振幅随时间的演化[21]

在写出相互作用 Hamilton 量(见式(4.5.12))时曾提及忽略自 Hamilton 量问题. 它带来的方便是：指针态都是定态，因此复合体的演化就可以直接写出(例如式(4.6.9)). 这个

假定对一些体系会失效,但宏观体系的开放性(与环境不能隔离)以及环境在宏观水平时使叠加原理失效的作用仍可作为指导原则. 当每一个指针态都不是定态,就需要找出它的推广:对丧失纯态而变成混合态最有"抵抗力"的状态. W. Zurek, S. Habib 和 J. P. Paz[26]研究了作量子 Brown 运动的谐振子,定义了线性熵,然后求熵增加最小的条件,结论是这种状态就是相干态.

4.7 一个退相干的动力学模型

自从 1980 年代以来,开放体系的量子理论研究显著加强了. 很多在实验上可以研究的体系都属于这个范畴. 许多这类的体系属于宏观量子体系,对于它们,环境问题是至关重要的. 对环境问题的处理(或模拟)也能直接采用退相干. 一个易于处理的环境模型是一组大量的谐振子,也可采用与此等价的无质量量子场. 前者是 A. Caldeira 和 A. Leggett[27]的做法,是基于 R. Feynman 和 F. Vernon[28]关于量子体系和耗散体系相互作用的理论. 我们将在本书 7.5 节详细讨论这个模型. 后者是 W. Zurek 和 W. Unruh[29]所用的模型. 在这里我们简单介绍模型的基本概念而不进入技术细节. 记质量为 1 的谐振子坐标为 x(体系),它和在 q 方向传播的无质量标量场 $\varphi(q,t)$(环境)通过 Hamilton 量 H_{int} 相互作用:

$$H_{\text{int}} = \varepsilon x \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \tag{4.7.1}$$

此处 ε 是耦合常数. 令 $\mathcal{L}$ 为 Lagrangian 密度. 从体系的作用量 $\int \mathcal{L} \mathrm{d}t \mathrm{d}q$ 出发,可以导出谐振子与场的运动方程. 谐振子的运动方程是

$$\ddot{x} + \frac{\varepsilon^2}{2} \dot{x} + \Omega_0^2 x = -\varepsilon \dot{\varphi}_0, \tag{4.7.2}$$

此处 Ω_0 是谐振子的角频率,φ_0 是自由传播场的解. 方程式(4.7.2)可以看作是 Legevin 方程. 体系-环境相互作用的效应是双重的. 它导致阻尼力 $-\eta \dot{x}$,$\eta = \varepsilon^2/2$ 表示黏滞性,也导致随机的涨落力 $-\varepsilon\varphi_0$. 在通常的 Langevin 方程中的涨落力是 $\langle \dot{\varphi}_0(t) \dot{\varphi}(0) \rangle \sim \delta(t)$. 在高温近似下仅考虑标量场的热激发,略去与温度无关的力,我们取

$$\langle \dot{\varphi}_0(t) \dot{\varphi}_0(0) \rangle \approx \frac{k_{\mathrm{B}} T}{2} \delta(t) \tag{4.7.3}$$

粒子的密度矩阵 $\boldsymbol{\rho}(x, x')$ 在位置表象中按主方程(master equation)演化:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\rho}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H, \boldsymbol{\rho}] - \gamma(x - x')\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\rho}}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\rho}}{\mathrm{d}x'}\right) - \frac{2m\gamma kT}{\hbar^2}(x - x')^2 \boldsymbol{\rho}, \tag{4.7.4}$$

此处 H 是粒子的 Hamilton 量,γ 是弛豫率,T 是场 φ 的温度. γ 和黏滞系数 η 有关,而 η 决定于粒子和场在 H_{int} 中的耦合常数 ε,即有

$$\gamma = \frac{\eta}{2m}, \quad \eta = \frac{\varepsilon^2}{2}. \tag{4.7.5}$$

在式(4.7.4)中第一项是动力学演化,是 Schrödinger 方程的推论. 环境的耗散效应是第二项,第三项是导致 Brown 运动的涨落,是导致退相干的根源. Zurek 用一个例子对退相干时间尺度作一个估计. 考虑两个 Gauss 波包的相干叠加:

$$\chi(x) = \chi^{+}(x) + \chi^{-}(x), \tag{4.7.6}$$

波包宽度为 δ，它们的中心相距 Δx，$\Delta x \gg \delta$，见图 4.18. 密度矩阵

$$\rho(x, x') = \chi(x)\chi^*(x') \tag{4.7.7}$$

在 (x, x') 平面上有 4 个峰(图 4.19)，两个来自对角元(峰的位置 $x = x'$)，两个来自非对角元 $(x = -x')$. 主方程式(4.7.4)最后一项和 $(x - x')^2$ 成正比. 它对对角元影响不大，但对非对角元成为导致衰减的因子. 衰减率可以直接从方程读出：

$$\tau_D^{-1} \approx 2\gamma \frac{mkT(\Delta x)^2}{\hbar^2},$$

退相干时间 τ_D 是

$$\tau_D \approx \tau_R \frac{\hbar^2}{2mkT(\Delta x)^2} = \tau_R \left(\frac{\lambda_T}{\Delta x}\right)^2. \tag{4.7.8}$$

注意到 $\lambda_T = \frac{\hbar}{\sqrt{2mkT}}$ 是热 de Broglie 波长，$\tau_R = \frac{1}{\gamma}$ 是弛豫时间，τ_D 可以写作

$$\tau_D = \tau_R \left(\frac{\lambda_T}{\Delta x}\right)^2. \tag{4.7.9}$$

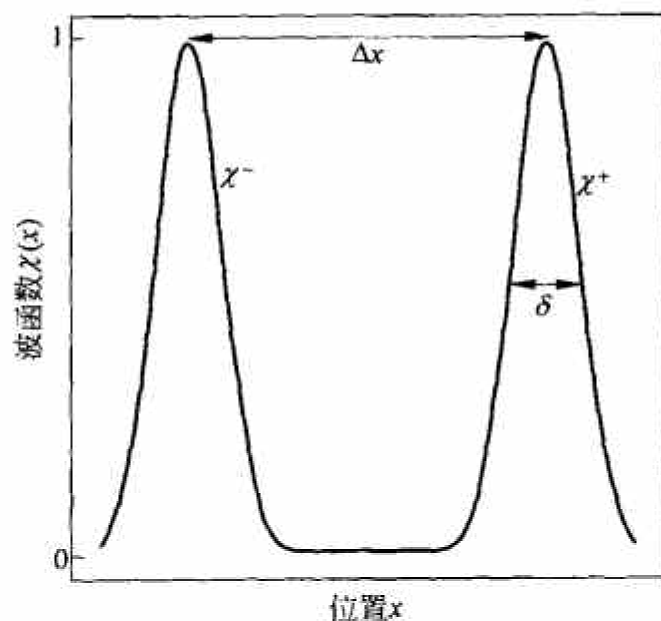


图 4.18　两个 Gauss 波包的相干叠加. 取自[23]

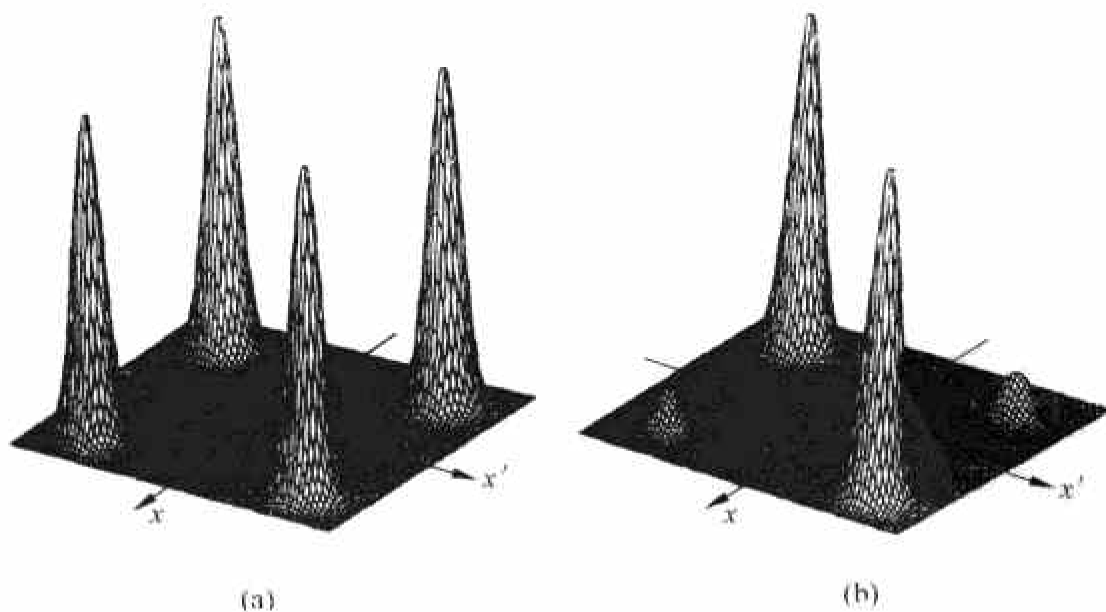


图 4.19　波包χ的密度矩阵. 取自[23]

(a) $t=0$ 时；(b) 部分退相干

对宏观物体 $\tau_D \ll \tau_R$. 例如 $T=300\mathrm{K}$, $m=1\mathrm{g}$, $\Delta x=1\mathrm{cm}$, $\tau_D/\tau_R=10^{-40}$. 宏观上可区别的位置间的退相干是近于瞬间发生的. 在图 4.19(b)中非对角峰也接近消失,两个对角元的峰就可以当作经典的位置分布函数了. 另一个极端情况,引力波探测器(低温 Weber 棒)$m=100\mathrm{kg}$, $T=10^{-3}\mathrm{K}$, $\Delta x=10^{-19}\mathrm{cm}$, 它的 τ_D/τ_R 可以大到 10^{-2}. 退相干被低温和所需的高精度位置测量大大延缓了. 如此庞大的棒必须作为量子谐振子处理①.

4.8　量子动力学的经典极限

量子力学是在 Hilbert 空间表述的,而经典力学是在相空间表述的. 量子动力学和它的经典极限间的关系可以通过波函数的 Wigner 变换[39]表示:

$$W(x,p)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}py/\hbar}\psi^*\left(x+\frac{y}{2}\right)\psi\left(x-\frac{y}{2}\right)\mathrm{d}y. \tag{4.8.1}$$

Wigner 分布 $W(x,p)$是实函数,但可能是负值,因此一般情况下不能作为分布函数诠释. 但如将 $W(x,p)$对 p 积分,有

$$\int_{-\infty}^{\infty}W(x,p)\mathrm{d}p=\int_{-\infty}^{\infty}\delta(y)\psi^*\left(x+\frac{y}{2}\right)\psi\left(x-\frac{y}{2}\right)\mathrm{d}y=\psi^*(x)\psi(x), \tag{4.8.2}$$

正是 x 的分布函数. 求 ψ 的 Fourier 变换:

$$\phi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\xi/\hbar}\Psi(\xi)\mathrm{d}\xi, \tag{4.8.3}$$

对 p 的分布函数是

$$\phi^*(p)\varphi(p)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(\eta-\xi)/\hbar}\psi^*(\eta)\psi(\xi)\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta. \tag{4.8.4}$$

令

$$\eta=x+\frac{y}{2},\quad \xi=x-\frac{y}{2}, \tag{4.8.5}$$

有

$$\begin{aligned}\varphi^*(p)\varphi(p)&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}py/\hbar}\psi^*\left(x+\frac{y}{2}\right)\psi\left(x-\frac{y}{2}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\\&=\int_{-\infty}^{\infty}W(x,p)\mathrm{d}x,\end{aligned} \tag{4.8.6}$$

即 $W(x,p)$对 x 积分给出 p 的分布函数.

对最小不确定波包

$$\psi(x)\approx\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{\delta^2}+\mathrm{i}\frac{p_0x}{\hbar}\right], \tag{4.8.7}$$

Wigner 分布函数是

$$W(x,p)=\frac{1}{\pi\hbar}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{\delta^2}-\frac{(p-p_0)^2\delta^2}{\hbar^2}\right] \tag{4.8.8}$$

这里 x 与 p 都是 Gauss 分布,满足最小不确定关系,说明 ψ(见式(4.8.7))是量子力学波函数(Hilbert 空间矢量)能给出的经典运动的粒子(相空间中一点)的最逼近的模拟.

Wigner 分布可以推广到密度矩阵

---

① 参阅本书第1章1.10节.

$$W(x,p)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}py/\hbar}\rho\left(x-\frac{y}{2},x+\frac{y}{2}\right)\mathrm{d}y. \tag{4.8.9}$$

对于式(4.7.6)给出的两个 Gauss 波包的相干叠加$\chi=\chi^{+}+\chi^{-}$，它的 Wigner 分布是

$$W\approx\frac{W^{+}+W^{-}}{2}+\frac{1}{\pi\hbar}\exp\left[-\frac{p^{2}\delta^{2}}{\hbar^{2}}-\frac{x^{2}}{\delta^{2}}\right]\cos\left(\frac{\Delta x}{\hbar}p\right), \tag{4.8.10}$$

此外W^{+}和W^{-}是χ^{+}和χ^{-}的 Wigner 分布. 图 4.20(a)画出式(4.8.10)给出的 Wigner 分布. 除两个对x和p变量都是 Gauss 型的分布外，还有由于第二项带来的振荡式分布. 由于W的振荡行为，它不能被诠释为相空间的分布. W的运动方程可以从主方程式(4.7.4)给出：

$$\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t}=\left(-\frac{p}{m}\frac{\partial W}{\partial x}+\frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial W}{\partial p}\right)+2\gamma\frac{\partial(pW)}{\partial p}+D\frac{\partial^{2}W}{\partial p^{2}}, \tag{4.8.11}$$

此处V是势能，

$$D=2m\gamma kT=\eta kT. \tag{4.8.12}$$

式(4.8.11)括弧中的第一项就是经典 Poisson 括号：

$$[H,W]_{\text{Poisson}}=\frac{\partial H}{\partial x}\frac{\partial W}{\partial p}-\frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial W}{\partial x}, \tag{4.8.13}$$

这是因为有

$$\frac{\partial H}{\partial x}=\frac{\partial V}{\partial x}\quad 和 \quad\frac{\partial H}{\partial p}=\dot{x}=\frac{p}{m}.$$

对谐振子，经典动力学在相空间中的 Liouville 形式从量子动力学得出. 对一般体系，式(4.8.11)右方还应有量级为$O(\hbar)$的量子修正. 第二项是阻尼项. 第三项是W在动量空间中的扩散，扩散系数为D(见式(4.8.12)). 实际上扩散项的效应是简单的. 由于式(4.8.10)中振荡项$\cos\left(\frac{\Delta x}{\hbar}p\right)$是$\frac{\partial^{2}}{\partial p^{2}}$的本征函数，扩散项倾向于减少振荡项，其衰减率为$\tau_{\mathrm{D}}^{-1}=2m\gamma kT\left(\frac{\Delta x}{\hbar}\right)^{2}$. 图 4.20(a)中的负值谷将在$\tau_{\mathrm{D}}$时间量级被基本填平(图 4.20(b)). 这时就可以给W以几率分布的诠释. 分布形成两个在x,p都是 Gauss 型分布的波包，相当在相空间中两个点. 它们的出现是等几率的，在这个例子中退相干和阻尼是联系在一起的.

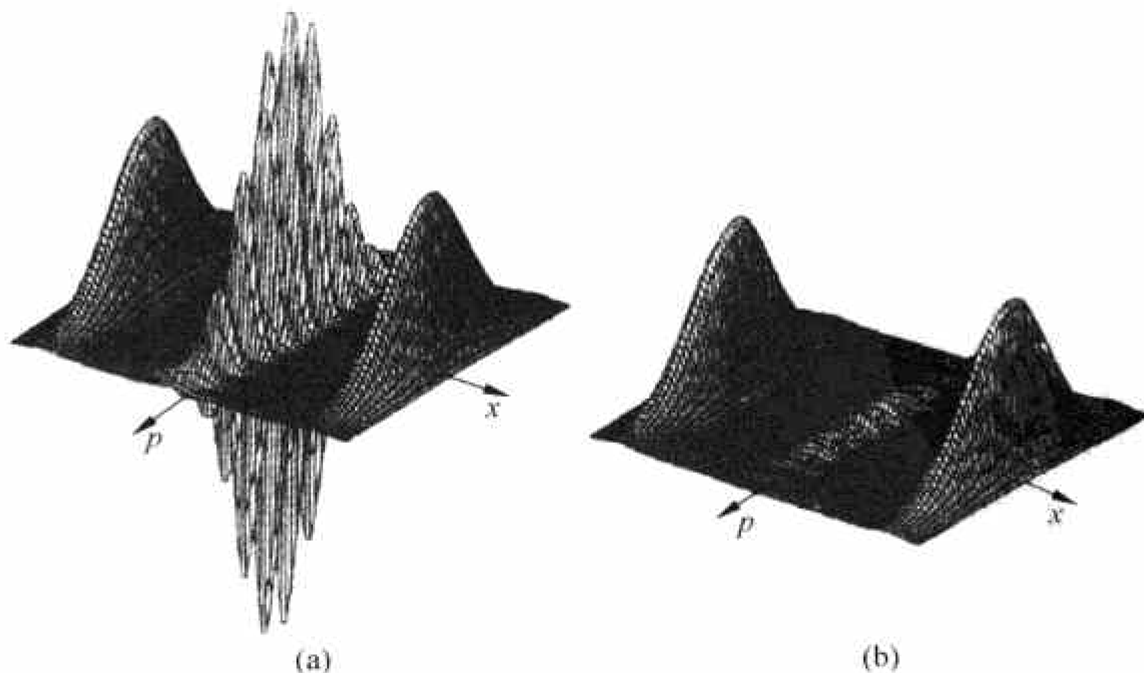


图 4.20 阻尼导致退相干. 取自[23]

(a) 相干波包叠加的 Wigner 分布；(b) 分布在动量空间扩散导致去相干

在前面几节中，从量子力学规律的普遍性出发，讨论了宏观体系在环境的影响下退相干而显出经典性质. 与此平行的还有另外一个问题，宏观体系是否有可能保持量子力学性质呢？超流与超导的发现给人们以启示，某些宏观的粒子体系也有量子力学性质. 环境的作用仍是重要的，但在一定条件下相位的相干性仍能保持. 这将在第6章中讨论. 问题的两个方面实际上支持一个统一观点：量子力学的规律是普遍的，既应用于微观体系，也应用于宏观体系. 在某些条件下，宏观体系显示量子行为，例如具有 Josephson 结的超导环，或是重以吨计的引力波探测器，而在其他条件下作为量子力学定律的后果，显示经典行为.

退相干与波包编缩究竟是量子力学的推论，还是需要从量子力学之外给予假设，物理学家的意见是分歧的. 在20世纪60—70年代，第一种观点属于少数，从70年代起持这种观点的人数持续增加. 在这个方向上也有各种不同的具体的实现方式[31,32,33]. 这里只介绍了 Zurek 的观点，他的文章[23]发表后引起热烈的讨论和争论[34].

4.9 实验室中实现的 Schrödinger 猫

一个量子力学体系(可以是微观的，也可以是宏观的)处于两个状态的相干叠加状态之中，而这两个状态必须是在宏观上可以区别的，该体系就是一只 Schrödinger 猫. “宏观上可区别”的意义需针对具体情况讨论.

4.9.1 单原子级的 Schrödinger 猫

1996年有两项关于在实验室中制备了 Schrödinger 猫的报道. NIST 研究组(D. Wineland 和 C. Monroe 等)[35,36,37]实现的是单原子级的 Schrödinger 猫. 在这里宏观上可区别的意思是一个原子处于在空间上明确分离的两个谐振子相干态的叠加态上. $^9Be^+$ 离子($n=2$，有一个电子)经激光冷却被捕陷于离子阱中. 离子阱相当于一个三维谐振子势 $\frac{1}{2\pi}(\omega_x,\omega_y,\omega_z)=(11.2,18.2,29.8)$MHz. 离子的有关电子能级是 $^2S_{1/2}(F=2,m_F=-2)$ 和 $^2S_{1/2}(F=1,m_F=-1)$，分别用 $|\downarrow\rangle_i$ 及 $|\uparrow\rangle_i$ 表示，i 指内部运动，括弧中是与超精细结构有关的量子数. ^{9}Be 核自旋为3/2，核自旋与电子自旋耦合生成总自旋 $\boldsymbol{F}=\boldsymbol{s}+\boldsymbol{I}$，$F=2$ 或 1，m_F 是 $\boldsymbol{F}$ 的投影. 量子化轴由外加磁场 $\boldsymbol{B}$ 提供，离子的内部运动(电子能级)和质心运动(在谐振子场中)通过激光束调控. 图4.21(a)给出 $|\uparrow\rangle_i$ 和 $|\downarrow\rangle_i$ 间的超精细劈裂是 $\omega_{HF}=1.250$GHz. 它们又各有标为0,1,2,…的态. 这是质心运动的谐振子量子数. $|\uparrow\rangle_i$ 和 $|\downarrow\rangle_i$ 通过激光束 a 与 b 实现二光子耦合. a 和 b 的频差为 ω_{HF}，分别能将 $|\downarrow\rangle_i$ 和 $|\uparrow\rangle_i$ 激发到 $^2P_{1/2}(2,-2)$ 附近的虚能级上，失谐 $\Delta\approx-12$GHz. 这样 $|\uparrow\rangle_i$ 和 $|\downarrow\rangle_i$ 之间通过二光子过程(以虚能级为中间态)往返跃迁(称为 Rabi 振荡). 这种耦合称为二光子 Raman 耦合. 离子的内部(电子)态就是 $|\uparrow\rangle_i$ 和 $|\downarrow\rangle_i$ 的相干叠加，实验步骤如下.

(1) 通过调节激光束 a,b(称为载带束)的照射时间控制叠加系数的大小. 例如在开始时离子处于 $|\downarrow\rangle_i$ 态(见图4.22(a))，则用 $\pi/2$ 脉冲(时间为1/4 Rabi 周期)可使 $|\uparrow\rangle_i$ 态和 $|\downarrow\rangle_i$ 态权重相同. 产生的态为(见图4.22(b))

$$\Psi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}[|\downarrow\rangle_i|0\rangle_e-ie^{-i\varphi}|\uparrow\rangle_i|0\rangle_e],\tag{4.9.1}$$

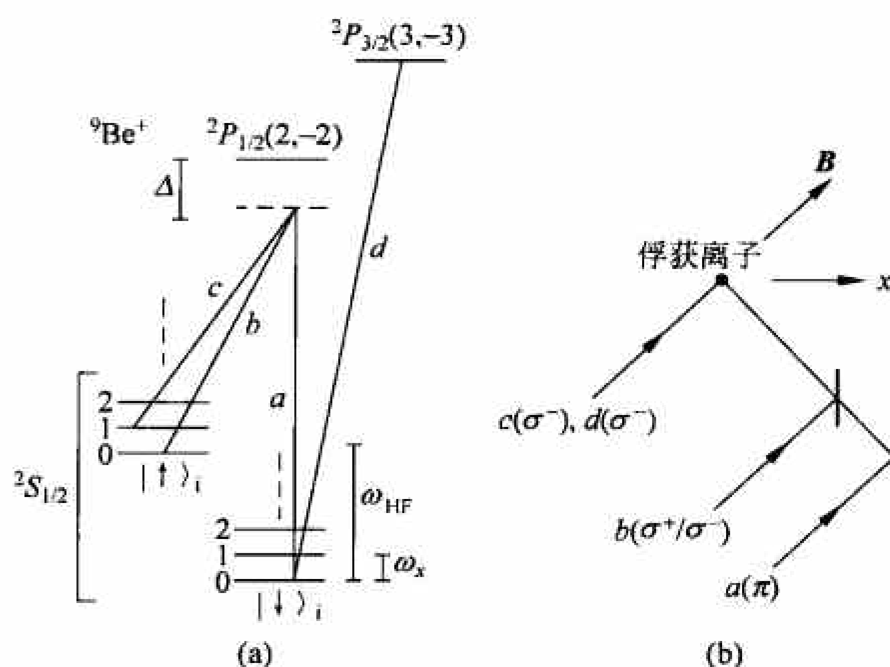


图 4.21 二光子 Raman 耦合产生 Schrödinger 猫. 取自[35]

(a) ^{9}Be$^+$ 离子的电子能级与质心运动能级；(b) 激光束的几何及偏振状态和外磁场方向

此处$|0\rangle_e$ 代表质心运动基态，e 是外部运动之意. 载带使两个态间产生一定相差. 实验中共使用三次载带束，相角是相对的. 以最后一次载带为标准，定它的相角为 0. 此次相角为$-\mu$，从$|\downarrow\rangle_i$ 到$|\uparrow\rangle_i$ 相因子为$-\mathrm{ie}^{-\mathrm{i}\mu}$.

(2) 为了使叠加(见式(4.9.1))成长为两个宏观可区别的态的相干叠加，利用对质心运动的调控，把它们分开一个宏观的距离. 方法是使用"移位"激光束 b 和 c，它们的频差为 $\omega_x/2\pi=11.2\mathrm{MHz}$，正好使两个相邻的 x 方向谐振子态二光子 Raman 耦合起来. 通过较长的照射时间，可以使核心运动$|0\rangle_e$ 跃迁到相干态：

$$|\beta\rangle_e = \mathrm{e}^{-|\beta|^2/2}\sum_n \frac{\beta^n}{(n!)^{1/2}}|n\rangle_e,$$

此处

$$\beta = \alpha \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta},$$

α 和 θ 为实数，见图 4.22(c). 相干态的平均量子数为$\langle n\rangle=\alpha^2$，相应的谐振子振幅为 $2\alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_x}}$. 通过激光束的偏振 $a(\pi)$，$b(\sigma^+/\sigma^-)$，$c(\sigma^-)$①，可以使移位束只影响内部态$|\uparrow\rangle_i$，因为 c 的偏振态σ^-不能将内部态$|\downarrow\rangle_i$ 和任何虚$^2P_{1/2}$态耦合起来. 移位束使内部态和外部态产生缠绕. 从 ω_x 的数值给出 $x_0=7.1\mathrm{nm}$，这是相干态波包的均方根大小. 操作后的状态为

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle_i|0\rangle_e - \mathrm{ie}^{-\mathrm{i}\mu}|\uparrow\rangle_i|\alpha \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi/2}\rangle_e). \tag{4.9.2}$$

往 X 正向的称位束产生的相干态相位为$-\phi/2$. 图中的抛物线代表谐振子势能.

(3) 为了扩大两个叠加态的距离，先使他们内部态互换：用 π 脉冲$\left(\text{时间为}\frac{1}{2}\text{Rabi 周期}\right)$载带束使$|\uparrow\rangle_i\to|\downarrow\rangle_i$，$|\downarrow\rangle_i\to|\uparrow\rangle_i$. 载带束相角为 ν. $|\uparrow\rangle\to|\downarrow\rangle$跃迁带来相因子为$-\mathrm{ie}^{\mathrm{i}\nu}$. 操作后的状态为(见图 4.22(d))

$$\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathrm{ie}^{-\mathrm{i}\nu}|\uparrow\rangle_i|0\rangle_e + \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\nu-\mu)}|\downarrow\rangle_i|\alpha \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi/2}\rangle_e), \tag{4.9.3}$$

① σ 与 π 分别为平行于和垂直于外磁场(激光束)方向，见图 4.21(b).

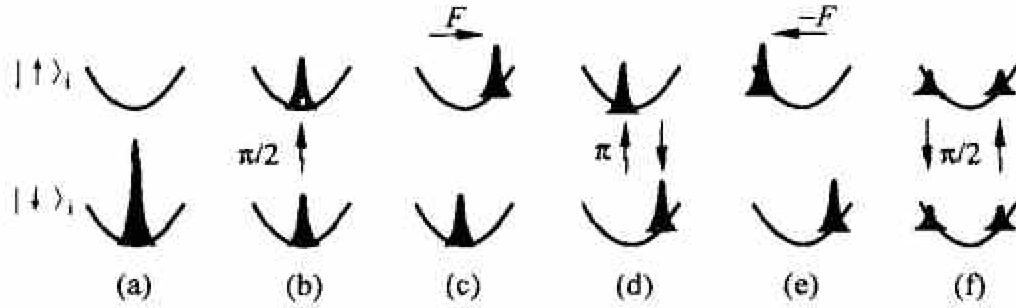


图 4.22　与内部态缠绕的波包演化. 取自[35]

(a) 波包初始位置；(b) 第一次载带 π/2 脉冲，0.5μs；(c) 移位，约 10μs；
(d) 第二次载带 π 脉冲，1.0μs；(e) 称位，约 10μs；(f) 第三次载带 π/2 脉冲，0.5μs

式中弃去了两项共同的负号.

(4) 两次使用移位束，将 $|\uparrow\rangle_i$，$|0\rangle_e$ 移向 $-x$ 方向，相位为 $\phi/2$. $|\downarrow\rangle_i$ 态不受影响，操作后状态为(见图 4.22(e))

$$\Psi_4=\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathrm{ie}^{-\mathrm{i}\nu}\mid\uparrow\rangle_i\mid\alpha\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi/2}\rangle_e+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\nu-\mu)}\mid\downarrow\rangle_i\mid\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi/2}\rangle_e),\tag{4.9.4}$$

此时两态相距达到最大. 这时状态和 Schrödinger 猫最相似. 离子只有一个，它的状态是两态的相干叠加. 两态内部状态不同，外部运动是 Gauss 波包，相距一定距离. 对波包大小而言，这个距离是真正"宏观"的：实验中这个距离最大达 80nm，而单个波包大小约 7nm，原子大小是 0.1nm.

(5) 最后使用载带克 π/2 脉冲，使 $|\uparrow\rangle_i$ 和 $|\downarrow\rangle_i$ 各一分为二. 操作后状态为(见图 4.22(f))

$$\begin{aligned}\Psi_5=&\frac{1}{2}\mid\downarrow\rangle_i(\mid\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi/2}\rangle_e-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\mid\alpha\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi/2}\rangle_e)\\&-\frac{\mathrm{i}}{2}\mid\uparrow\rangle_i(\mid\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi/2}\rangle_e+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\mid\alpha\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta/2}\rangle_e),\end{aligned}\tag{4.9.5}$$

此处载带速相位为 0(标准)，上式中弃去了公共相因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\nu-\mu)}$，$\delta=\mu-2\nu+\pi$. Ψ_5 可以进一步改写为

$$\Psi_5=\mid\downarrow\rangle_i\mid S_-\rangle_e-\mathrm{i}\mid\uparrow\rangle_i\mid S_+\rangle_e,\tag{4.9.6}$$

此处

$$\mid S_\pm\rangle_e=\frac{1}{2}(\mid\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi/2}\rangle_e\pm\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\mid\alpha\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi/2}\rangle_e).\tag{4.9.7}$$

对 $\phi=\pi$，$\delta=0$，$|S_\pm\rangle$ 称为"偶猫"和"奇猫".

实验测量可以测 $P_\downarrow(\phi)$，即离子内部状态处于 $|\downarrow\rangle_i$ 的几率. 探测的方法是用探测激光束 d 照射离子(见图 4.21(a))，将 ${}^2S_{1/2}(2,-2)$ 激发到 ${}^2P_{3/2}(3,-3)$ 态，然后观测散射荧光. $P_\downarrow(\phi)$ 是外部运动相位 ϕ 的函数. 与内部运动 $|\downarrow\rangle_i$ 关联的是 $|S_-\rangle_e$. 随 ϕ 不同，$|S_-\rangle_e$ 的两项所代表的波包距离不同，波包距离近时，干涉效应显著. 波包的几率分布是 $|\langle x|S_-\rangle_e|^2$，考虑到随时间的演化，$\phi$ 是随时间线性变化的(见式(4.1.45)). 对 $\delta=0$ 的情况，$\phi=\pm\pi$ 时两个波包相距最远. 到 $\phi=0$ 时两个波包重合. 但由于 $\delta=0$，S_- 是"奇猫"，两个波包正好抵消. $P_\downarrow(\phi)$ 正是分布函数对 x 的积分：

$$\begin{aligned}P_\downarrow(\phi)&=\int_{-\infty}^{\infty}\mid\langle x\mid S_-\rangle\mid^2\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{2}[1-\mathrm{e}^{-\alpha^2(1-\cos\phi)}\cos(\delta+\alpha^2\sin\phi)].\end{aligned}\tag{4.9.8}$$

对足够大的 α，$P_{\downarrow}(\phi)$在 $\phi=0$ 附近显示振荡行为，这是两个波包干涉的表现(用猫的比喻，这是活猫与死猫的干涉)。对 $\delta=0$，$P_{\downarrow}(\phi)$作为 ϕ 的函数对 α 不同值的情况绘于图 4.23. 实验步骤不断重复进行：冷却，制备状态，探测，同时改变着相干态的相位 ϕ. 图(a)～图(d)是实验(点)和理论的比较，图(e)是理论曲线. 如果退相干发生，两个波包没有固定相位关系，则 $P_{\downarrow}(\phi)=\frac{1}{2}$. 每个系列测量都相应一定的 δ 值. 可以用挡住移位束的办法($\alpha=0$)，此时 $P_{\downarrow}(\phi)=\sin^2\frac{\delta}{2}$可以直接给出 δ. 相应不同的 δ，$P_{\downarrow}(\phi)$与 ϕ 的关系因之不同. 图 4.24 给出 $\alpha\approx1.5$ 时不同 δ 值的相应 $P_{\downarrow}(\phi)$. 图(a)$\delta=1.03\pi$，接近偶猫，因此在 $\phi=0$ 处相应相长干涉. 图(b)$\delta=0.48$. 图(c)$\delta=0.06\pi$，接近奇猫，在 $\phi=0$ 处是相毁干涉.

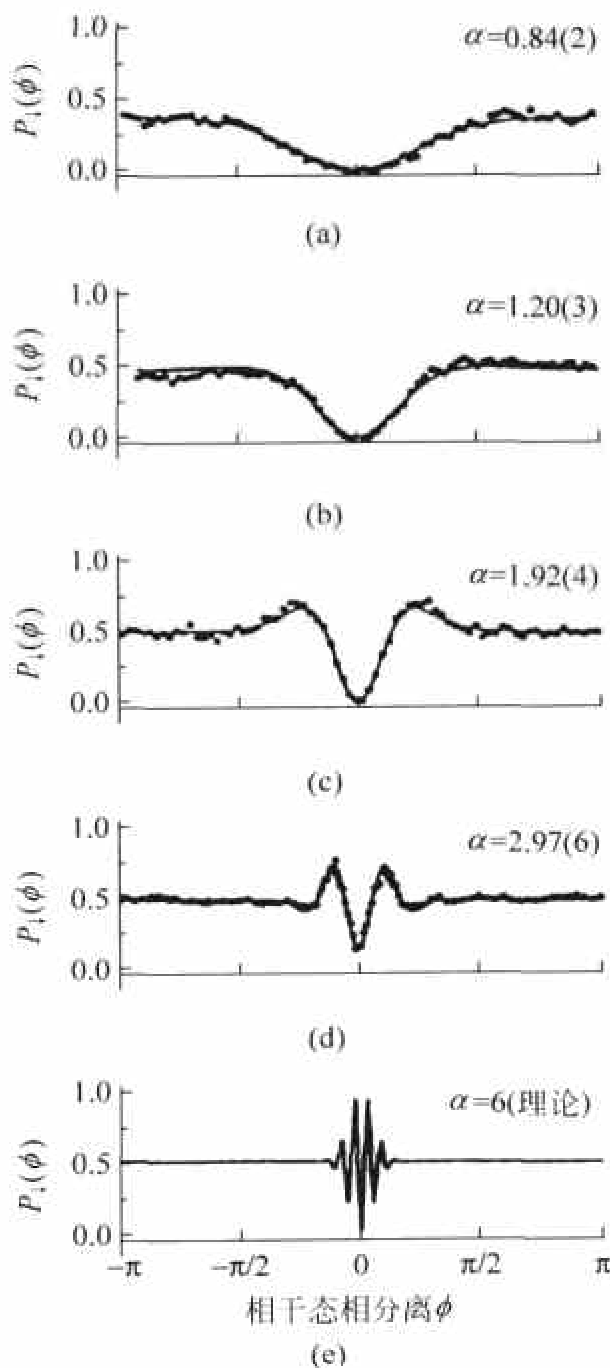


图 4.23 $\delta=0$ 时 $P_{\downarrow}(\phi)$实验与理论比较. 取自[35]

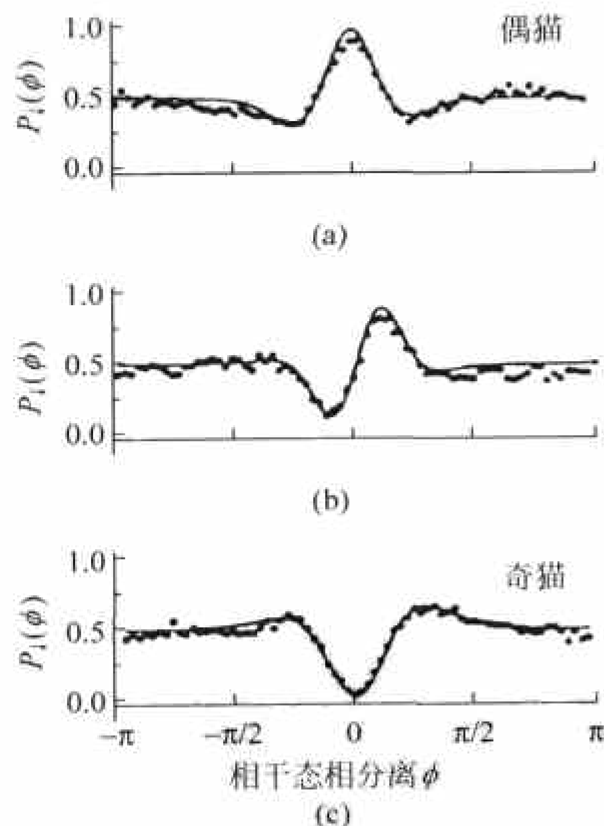


图 4.24 不同 δ 值时的 $P_{\downarrow}(\phi)$. 取自[35]

实验室实现 Schrödinger 猫并进行退相干研究，除在量子力学基本原理方面的重要意义外，对有潜在应用可能的量子计算机也是重要的. 因为量子计算机在完成计算以前必须保持相干叠加状态，因此退相干时间成为它至关重要的指标. 上面描述的实验还不能对退相干时间进行测量，NIST 研究组[38]在上述实验的基础上进行了退相干速率的研究. 在实验中退

相干是由体系(俘获原子)和一个设计好的环境库的耦合诱导的，而这个耦合是能够控制的.系统是两个相干态的叠加，

$$|\psi\rangle = N(|\alpha_1\rangle + |\alpha_2\rangle). \tag{4.9.9}$$

它和环境库的耦合是通过相互作用实现的，相互作用正比于系统振动与环境的涨落幅的乘积.一个定标律①给出在退相干过程中剩余相干性 $C(t)$ 是

$$C(t) = e^{-|\alpha_1-\alpha_2|^2\zeta t}, \tag{4.9.10}$$

此处 ζ 是体系与环境库的耦合，$|\alpha_1-\alpha_2|$ 可以看作是两个状态 α_1 和 α_2 在"Hilbert 空间中的距离"，或"叠加的大小".库中的内容是沿俘获阱轴方向的准随机电场，场的频率在粒子轴向运动的频率附近振荡.叠加的相干性由单原子干涉仪测量.从离子 $F=1, m_F=1$ 的自旋初态(记为 $|\downarrow\rangle$)和外部运动的基态出发，用文献[37]描述的实验方法制备猫态.制备之后就将猫态和库耦合起来.然后将制备过程逆转以获得干扰后的叠加.最后确定结果状态的相干性.研究[38]得出离子在 $|\downarrow\rangle$ 态的几率是：

$$P_\downarrow = \frac{1}{2}(1 - e^{-2|\Delta\alpha|^2\sigma^2}\cos\delta), \tag{4.9.11}$$

此处 $\sigma^2 \propto \langle V^2\rangle$，$V$ 是施加的随机电压，δ 是最后一个载带束与第一个载带束间的相差.结果示于图 4.25，此处条纹对比度定标在 $\langle V^2\rangle=0$ 时为 1.叠加大小 $|\Delta\alpha|$ 与位移束脉冲时间线性相关.实验数据与理论符合很好.

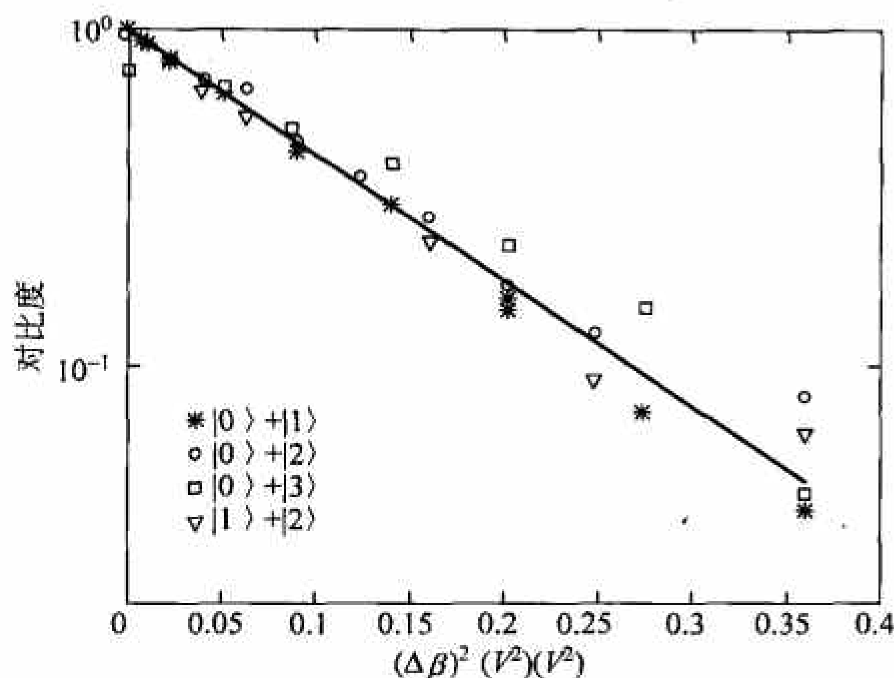


图 4.25 与环境相库耦合的 Fock 态叠加的退相干.取自[38]

一个单原子能看成是猫吗？物理学家意见分歧. W. Zurek 以为应该叫它是 Schrödinger 猫崽.

4.9.2 Schrödinger 位相猫

S. Haroche 的研究组[39]利用腔量子电动力学方法制备了腔中电磁振荡相干态的叠加②.图 4.26 是实验装置示意图.图中 C 是高品质超导(Nb)腔. Rb 原子从炉 O 中引出，经

① 参阅 D. F. Walls, G. J. Milburn. *Quantum Optics*. Springer, 1994.

② 形成缠绕态的叠加的物理过程将在本书 8.2 节讨论，见式(7.3.16).

过选定激光束激发之后，从盒 B 出来的是速度确定的位于"圆 Rydberg 态"$n=51$，$l=50$ 的 Rb 原子．控制激光脉冲使得原子间隔够大，通过超导腔的是单个原子（间隔 1.5ms）．低 Q 腔 R_1 调得与 $n=51$，$l=50$（称为 e）到 $n=50$，$l=49$（称为 g）态跃迁频率 $\nu_0=51.099$GHz 共振，并在 R_1 上加共振 $\pi/2$ 脉冲使原子处于叠加态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|e\rangle+|g\rangle)$ 上．原子进入微波源 S 激励的超导腔 C，C 的频率调得与 ω_{eg} 失谐为 δ，腔中的电磁场是 Glauber 相干态 $|\alpha\rangle$[①]：

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_n \frac{\alpha^n}{(n!)^{1/2}}|n\rangle.$$

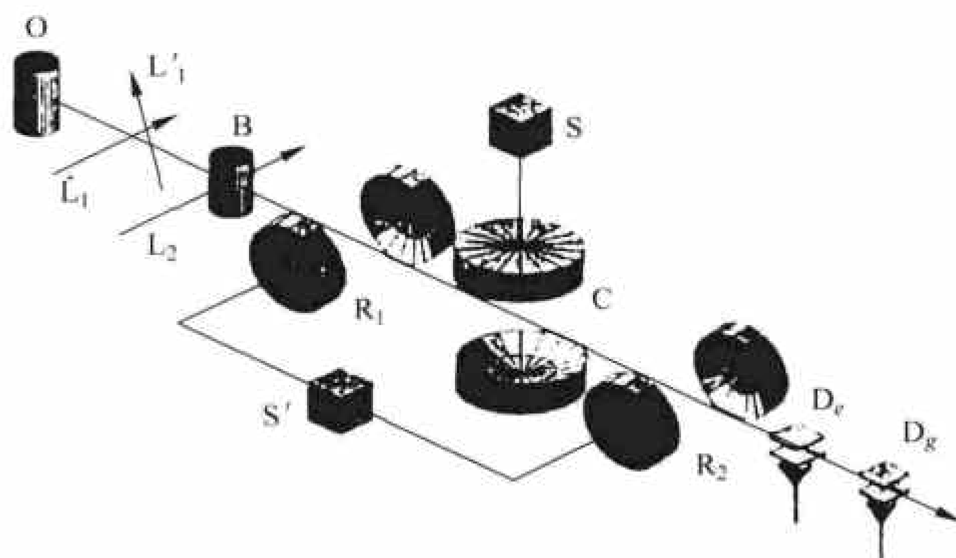


图 4.26 Haroche 实验装置示意图．取自[39]

由于失谐，原子通过腔时不能发生 $|e\rangle$ 与 $|g\rangle$ 之间的跃迁，但由于原子与场的相互作用，$|e\rangle$ 与 $|g\rangle$ 使场发生不同的相移[②]．因此 $|e\rangle$ 和 $|g\rangle$ 的相干产生了场的状态的相干．体系状态为

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e,\alpha e^{i\phi}\rangle + |g,\alpha e^{-i\phi}\rangle), \tag{4.9.12}$$

相移 ϕ 与失谐 δ 有关，且与 δ 成反比．通过调节失谐可以得到不同的 ϕ．R_2 是与 R_1 结构相同的腔，用同样的微波源 S' 激励（$\pi/2$ 脉冲）．原子在离开腔 C 以后通过 R_2．最后原子通过探测器 D_e 和 D_g，它们是场电离探测器，施加不同电压．D_e 电压低，刚好使 $|e\rangle$ 态原子电离．D_g 电压高些，能使 $|g\rangle$ 态原子电离．调节微波源 S′ 的频率 ν，使它扫过 ν_0，测量 $P_g^{(1)}(\nu)$，即原子处于 $|g\rangle$ 态的几率．在 10min 内记录了 50 000 事件，结果示于图 4.27(a)．它表明 C 中无场时，$P_g^{(1)}(\nu)$ 显示 Ramsey 条纹[③]，这是因为原子受到相隔 $T=230\mu$s 的两次脉冲（R_1 和 R_2）的结果．因 $e\to g$ 跃迁可能发生在 R_1，也可能发生在 R_2，两种不同可能的"路径"不可区别，在探测器处复合而发生量子干涉．图(b)～图(d)是 C 中有场，$|\alpha|=\sqrt{9.5}=3.1$，即场平均光子数为 9.5，失谐值分别为 $\delta/2\pi=712$，347 和 104kHz．两种场的不同相位情况画在右方插图内，插图中直线夹角为 ϕ．从图中可以看出除条纹移动外，明显地条纹对比度随 ϕ 的增加而减小．原子离开 C 时处于式(4.9.12)所示状态．如果 ϕ 很小时，测量场的相位所能给出关于原子状态的信息不多，因此两条不同路径的干涉比较明显．当 ϕ 增大，测场的相位给出有关

① 即 4.1 节的正则相干态，此处 n 代表光子数．

② 请参阅本书 8.6 节．

③ 关于 Ramsey 干涉仪，请参阅本书 8.6 节．

原子的信息增加,因此干涉必然减弱.

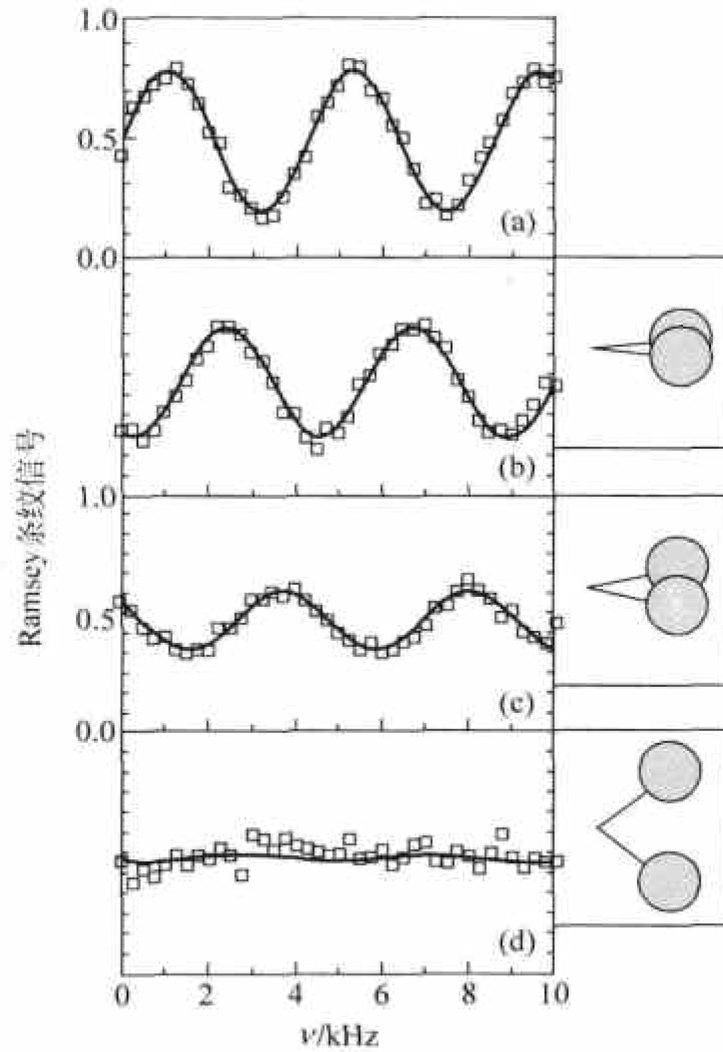


图 4.27　$P_g^{(1)}(\nu)$表现出 Ramsey 条纹. 取自[39]

从图 4.24 可以看到,场的两种状态(相角 ϕ 和 $-\phi$)愈是接近宏观可分辨($|\phi|$大)其相干愈弱,但明确给出相干的宏观可分辨态. 这个实验通过测量原子的状态给出在一定距离以外的腔 C 中场的状态. 此外,如不放置腔 R_2,则场的状态是式(4.9.12). 测原子位于$|e\rangle$或$|g\rangle$给出的远处场的状态相应地是 ϕ 和 $-\phi$. 但如放置 R_2,它再次混合两个 Rydberg 态$|e\rangle$和$|g\rangle$. 调节 S′脉冲的相位,可使通过 R_2 的原子位于$(|e\rangle+|g\rangle)/\sqrt{2}$和$(|g\rangle-|e\rangle)/\sqrt{2}$,而场的状态不变. 原子通过 R_2 后体系波函数变为

$$\psi_2=|e\rangle\frac{|\alpha e^{i\phi}\rangle-|\alpha e^{-i\phi}\rangle}{\sqrt{2}}+|g\rangle\frac{|\alpha e^{i\phi}\rangle+|\alpha e^{-i\phi}\rangle}{\sqrt{2}}\tag{4.9.13}$$

此时测得原子位于$|e\rangle$或$|g\rangle$给出的场状态相应地是$(|\alpha e^{i\phi}\rangle-|\alpha e^{-i\phi}\rangle)/\sqrt{2}$和$(|\alpha e^{i\phi}\rangle+|\alpha e^{-i\phi}\rangle)/\sqrt{2}$. 这不仅体现了远距离的量子关联("非定域性"),而且可依据放置 R_2 与否作为推迟选择:待原子通过腔后再作选择,结果是不同选择给出场的不同状态.

这个实验的优越性还在于能对退相干进行研究. 第一个原子在腔中产生了两个宏观可区别的场状态(相角 $-\phi$ 和 ϕ). 再发出一个原子通过腔,对场再产生相移,结果是出现三种场,相移为 $-2\phi,0,+2\phi$. 相移为 0 的这个分量有两种可能. 其一是第一个原子以 e 状态通过,第二个原子以 g 状态通过(记为(e,g)),其二是(g,e). 这两种可能不能区分,因此在测量联合几率 $P_{ee}^{(2)},P_{eg}^{(2)},P_{ge}^{(2)},P_{gg}^{(2)}$时会有干涉. 定义"二原子关联信号"$\eta$:

$$\eta=\frac{P_{ee}^{(2)}}{P_{ee}^{(2)}+P_{eg}^{(2)}}-\frac{P_{ge}^{(2)}}{P_{ge}^{(2)}+P_{gg}^{(2)}}\tag{4.9.14}$$

如果场处于量子相干(叠加)态$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha e^{i\phi}\rangle \pm |\alpha e^{-i\phi}\rangle)$，则 η 是常数. 如果场变为非相干的统计混合，则 η 为 0. 图 4.28 给出 η 和 τ/T_r 的关系，τ 是两个原子通过腔的时间间隔，T_r 是腔的品质因数 Q 所决定的光子平均寿命(实验用的 $T_r = 160\mu s$). 从图可以看出，当 t/T_r 接近 1 时 η 已趋于 0，即相干已不存在. 此外退相干时间与 ϕ 的大小有关，ϕ 大时退相干的时间要短得多.

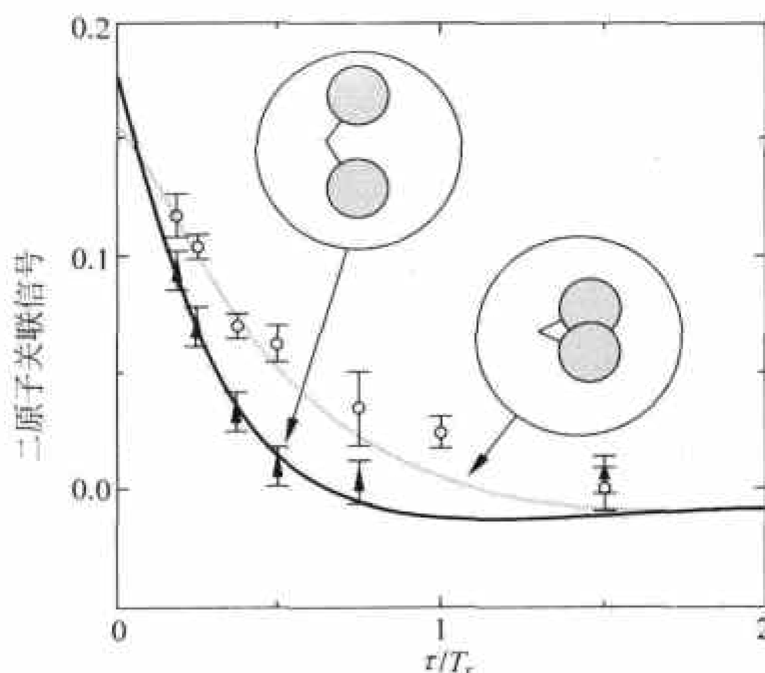


图 4.28 二原子关联信号与 τ/T_r 关系. 取自[39]

关于退相干和实验室中实现 Schrödinger 猫的内容，可以参阅文献[40].

4.9.3 宏观 Schrödinger 猫

Stony Brook 纽约州立大学研究组(C. J. Friedman)[41]在实验上验证了 SQUID(超导量子干涉装置)的宏观量子相干现象，直接测量了叠加态的隧穿劈裂. 在 19 世纪 50 年代 N. Bogoliubov 引入了超导体中 Cooper 对凝聚的波函数，建立了宏观量子体系的概念. Josephson 体系一直是宏观量子现象的研究对象①. SQUID 是一个电感为 L 的超导环，环中嵌有一个电容为 C、极限电流为 I_C 的 Josephson 隧穿结. 在平衡时可以有超导电流 I 流经环中，其产生的磁通量 LI 通过环中空间. 当有外加磁通 Φ_x(与超导电流的磁通方向相反)时，合成磁通为 $\Phi = \Phi_x - LI$. Cooper 对的波函数是单值的，因此波函数的相位沿环连续变化(除去在 Josephson 结处)，当绕行一周回到原处时，相位的变化必须为 2π 的整数倍(f 倍). 量子数 f 定义 SQUID 环的通量态(fluxoid state). 当 $f=0$(或 1)时超导电流抵消(或加强)外加通量 Φ_x. 在实验中超导电流大于 $1\mu A$，相当于 10^6 个 Cooper 对的流动，产生的磁矩可达 $10^7\mu_B$. 这个体系可以认为是宏观的. SQUID 的动力学可以用穿过环中空间的磁通描述②，体系的 Hamilton 量为

① 见本书 6.1～6.3 节.

② 虽然 Φ 在一般情况下是宏观的，但显示量子行为. 通量正比于超导电流，而与波函数相位有关. 在 Hamilton 量式(4.9.15)中电容能量要小得多，因此 Φ 可以在相位-粒子数不确定关系的限制下充分准确地描述，因为粒子数是宏观量，一定的误差是可以允许的.

$$H = \frac{1}{2}C\dot{\Phi}^2 + V(\Phi). \tag{4.9.15}$$

式的右方第一项相当于动能,第二项是势能,

$$V(\Phi) = \frac{(\Phi_x - \Phi)^2}{2L} - I_c \frac{\Phi_0}{2\pi}\cos 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}. \tag{4.9.16}$$

此处 Φ_0 是磁通量子. 对 $\Phi_x = \Phi_0/2$,势能 $V(\Phi)$ 是对称双阱,示于图 4.29. 当 Φ_x 偏离此值时,双阱是不对称的,示于图 4.30(a). 两个通量态 $f=0$ 和 $f=1$ 相当于分别位于左阱和右阱的态. 双阱是量子力学中一个有趣的话题. 先考虑双阱中有一个粒子. 低能量态 $|L\rangle$ 和 $|R\rangle$ 主要分别局域在左阱和右阱中,能量是简并的. 当能级的能量愈来愈高时,隧穿阱间势垒的几率已不能忽略,$|L\rangle$ 和 $|R\rangle$ 混合起来,能量本征态变为 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle \pm |R\rangle)$,它们的能量差 Δ 被称为隧穿劈裂,因为兼并是由隧穿而取消的. 对称的叠加是基态. 如果最初在左阱制备好 $|L\rangle$ 态(由于隧穿不可忽略,它已经不再是本征态了),体系的状态将在 $|L\rangle$ 与 $|R\rangle$ 之间周期性振荡,频率为 $\Gamma = \Delta/\hbar$. 这就是量子相干问题. 它对于形成如 NH_3 这样的分子的化学键是很重要的①. 问题在于,在如 SQUID 的宏观体系中,叠加态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle \pm |R\rangle)$ 是否仍然有意义. 单粒子的量子相干源于隧穿,但对于永远和环境耦合的宏观体系,问题要复杂得多. 在 1983 年 A. Caldeira 和 A. Leggett 给出对这个问题的系统回答②. 如果体系和环境耦合很弱,体系仍能正常隧穿,叠加态就仍是体系的本征态,有隧穿劈裂. 它们是宏观猫态. 如果耦合是中等强度,隧穿仍有可能,但体系的隧穿不再是相干的了,即在阱间的跳跃已经不再是周期性的,而是随机的. 这称为断续跳跃. Schrödinger 猫态就没有意义了. 在此前,SQUID 的共振隧穿已在实验中被验证[30]. 线性叠加的验证在于直接测量隧穿劈裂. 为了这个目的,仔细考虑状态 $|g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ 和 $|e\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ 的能量随式(4.9.16)中参数的变化. 参数包括倾斜度 ε 和在 $\varepsilon=0$ 时的势垒高度 ΔU_0(图 4.30(a)). 在 ε 增加时,$|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的能量分别增加和减小,如图 4.30(b)所示. 在 $\varepsilon=0$(对称阱)时它们可能会交叉. 但交叉不会发生,因为隧穿撤销了兼并. 这被称为反交叉(anticrossing),或被避免的交叉(avoided crossing). 隧穿劈裂是很小的,因此难以测量. 想要能够分辨这个劈裂的必要条件是线宽必须小于 Δ. SQUID 对噪声和耗散都极为灵敏,二者都会增加线宽. 实验的挑战在于体系和探测仪器的耦合较弱,为了分辨相距甚近的能级需要足够的信号强度以及将系统和外来噪声屏蔽开来. 这些都是过去实验观测 SQUID 量子相干却失败的原因. 图 4.30(c)是实验装置示意图. 为了屏蔽噪声,将 SQUID 置于 PdAu 盒内. 外加磁通 $\Phi_{x,dc}$ 通过对 Josephson 结的作用控制 ΔU_0(式 4.9.16). 通量 Φ_x 是控制倾斜度 ε 的. dc SQUID 磁强计用以测量伴随通量 Φ 的反向,这代表 SQUID 状态的隧穿. 在实验中用微波脉冲产生"光协助隧穿"来测量两个激发态的反交叉. 微波产生激发态面临的势垒要低得多,这使隧穿几率加大,信号增强很多.

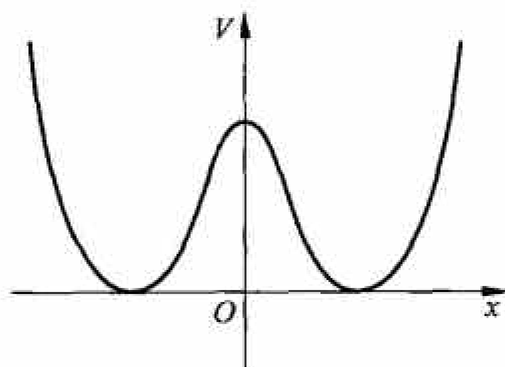


图 4.29　SQUID 对称双阱

① 参阅 The Feynman Lectures on Physics, vol Ⅲ, 8.6 节.

② 参阅本书 6.6 节.

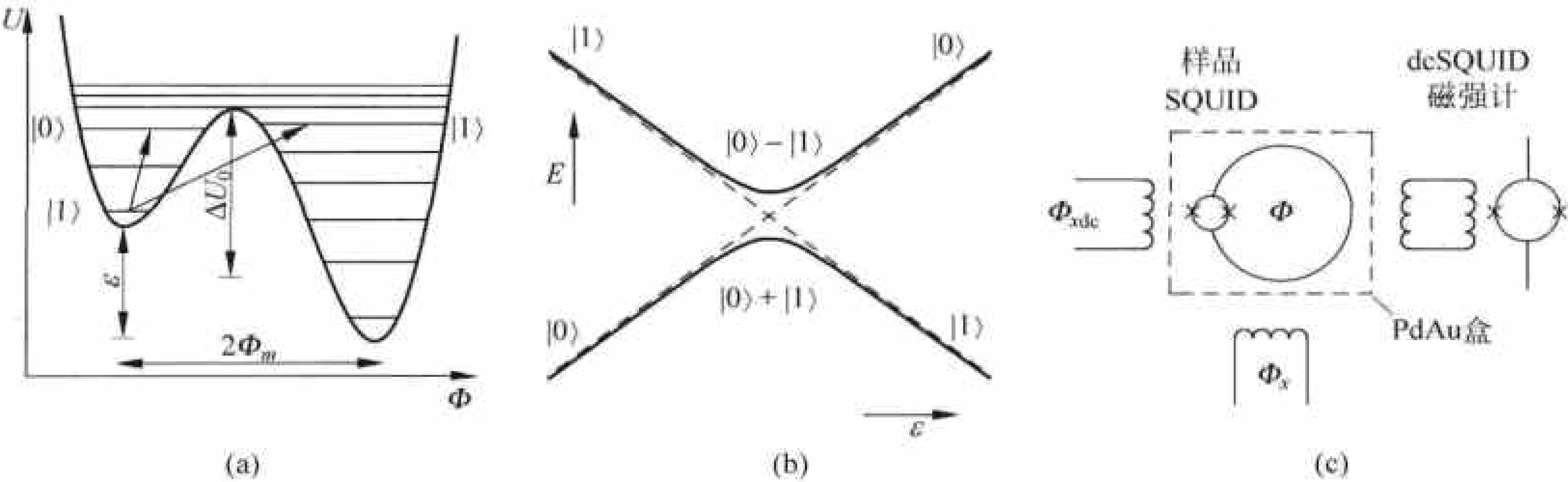


图 4.30
(a) SQUID 势；(b) 能级反交叉；(c) 实验安排. 取自[41]

体系最初状态在左阱最低态$|i\rangle$，势垒很高，隧穿可以忽略. 施加微波辐射：当初态和一个激发态的能量差和微波频率匹配时，体系有相当大的几率被激发，接着就隧穿到右阱. 用数值解法在无阻尼假定下解以下 Hamilton 量的能量本征值

$$H = \frac{1}{2C}p_{\Phi}^2 + V(\Phi, \Phi_x, \Phi_{x,\mathrm{dc}})$$

(此处 $p_{\Phi} = -\mathrm{i}\partial/\partial\Phi$, V 是式(4.9.16)的势)，就得到 SQUID 能级. 在图 4.31 中将解出的能级($\Delta U_0 = 9.117\mathrm{K}$)作为 Φ_x 的函数画出(细实线). 计算的势垒顶用粗实线画出. 点划线代表被微波辐射激发后的$|i\rangle$态. 在给定 Φ_x 值时这条线与一个激发态相交(用箭头标出)，在此处体系吸收一个光子并隧穿. 在垒高 $\Delta U_0 = 8.956\mathrm{K}$ 时不同的 Φ_x 值相应的能级用虚线代表. 不断减小势垒使能级向下移动，定出反交叉. 将光子协助隧穿几率作为 Φ_x 函数画出两个峰与反交叉上下两支相对应. 两个峰移动愈来愈近，然后远离，并不相遇. 数值计算的能量值与实验符合很好. Caldeira 和 Leggett 关于宏观量子相干的理论在 17 年后被证实.

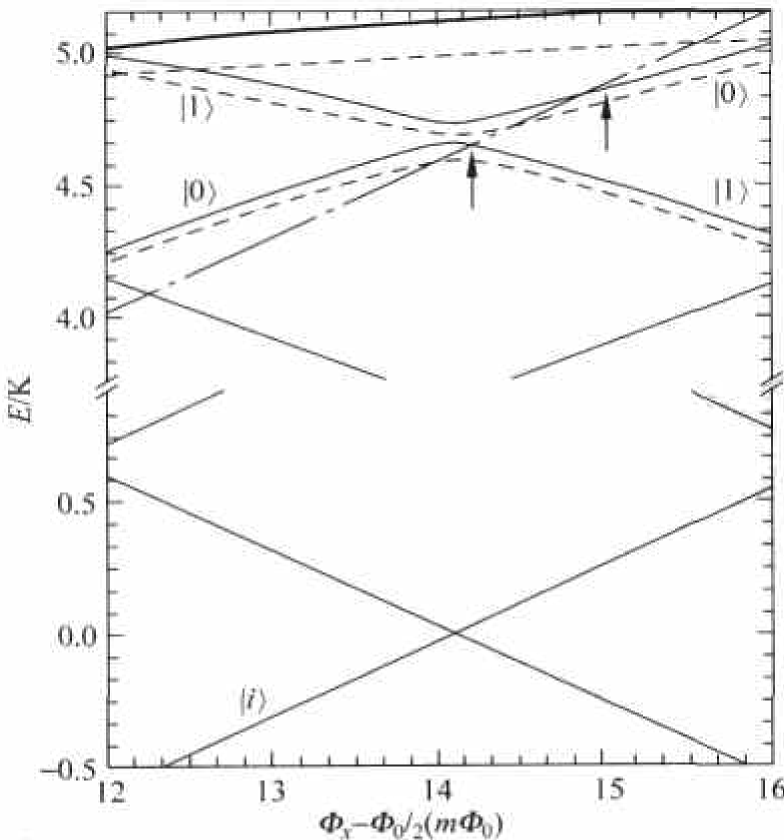


图 4.31 计算出的 SQUID 能级和光子协助隧穿. 取自[41]

4.9.4　热辐射发射造成退相干

量子体系与环境的相互作用把二者缠绕起来，量子体系的相位就被分配到环境的许多自由度，使它不再能被观察到. 大分子是研究退相干的极好对象，因为它具有许多内在模式. 在激发能量通过辐射释出时，因为辐射显示了"哪一条路径"的信息而引起退相干. C^{70}分子是很好的例子，它有 204 个振动模. A. Zeilinger 领导的维也纳大学研究组[43]控制分子在进入干涉仪之前的温度，通过观测干涉条纹的对比度来研究物质波的退相干.

一束 C^{70}分子通过聚焦激光束 16 次完成加热阶段. 温度受到检测，发现最热的分子在进入干涉以前的温度约为 3 000K. Talbot-von Lau 干涉仪有三个光栅. 第一个光栅的作用是提供狭缝的周期阵列，第二个光栅是衍射元素，第三个是扫描探测掩膜. 通过的分子用激光束电离，其强度作为在第三光栅处的横向位移的函数记录下来. 条纹可见度 $V=\frac{I_{max}-I_{min}}{I_{max}+I_{min}}$表征分子演化的相干性. V 随加热温度的变化示于图 4.32. 可见度随加热功率的增加而减小. 原因是光子发射几率随温度增加而增加. 0W 时为 47%，3W 时为 29%，6W 时为 7%，10.5W 时为 0%. 绝对计数率开始时随加热功率 P 的增加而上升，然后随加热功率 P 的增加而下降，原因是在加热过程中分子会电离和碎裂.

退相干也与分子速度有关：低速分子的归一化可见度随加热功率的增加而下降得更快. 退相干与加热功率的关系数据与退相干理论符合得很好[44].

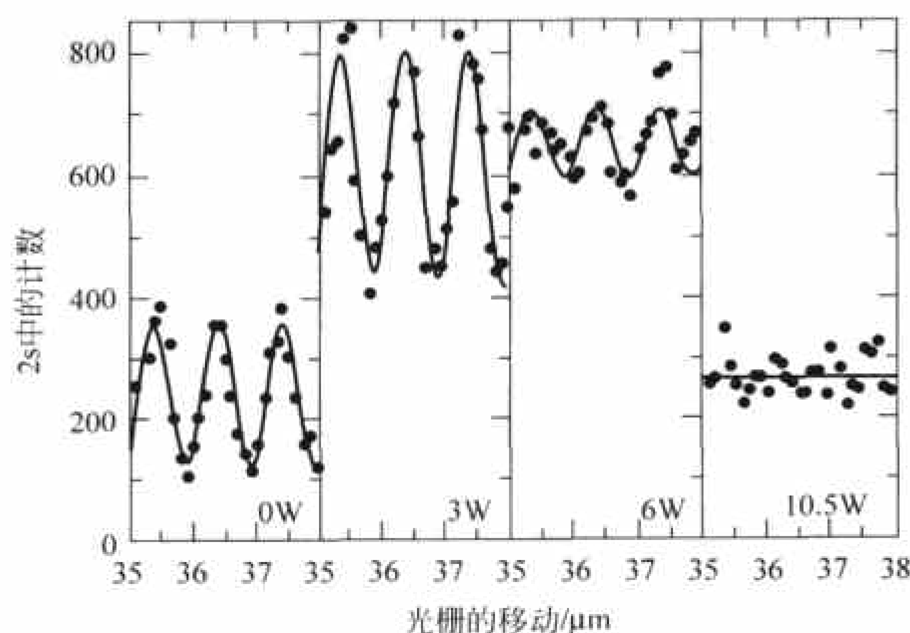


图 4.32　不同加热功率下 C^{70}分子干涉图，分子速度为 $190ms^{-1}$. 取自[43]

4.10　波函数塌缩和量子 Zeno 效应

J. von Neumann 引入的在测量过程中波函数塌缩的概念在量子力学的标准诠释中应用得很成功. 这个概念能够在实验中验证吗？ 1977 年 Misra 和 Sudarshan[45]提出了一个他们称为量子 Zeno 效应的验证波函数塌缩概念的方法. 考虑一下原子，它由激发态 ψ_2 跃迁到基态 ψ_1 的自然寿命为 τ. 设它在时间 $t=0$ 时位于激发态. 对它进行多次测量，每次测量使波函数塌缩并重新将时钟调零. 如果测量进行的足够频繁，到基态的跃迁可以无限地被延迟.

对于 $t \ll \tau$ 跃迁几率是

$$P_{2\to1} = \frac{1}{\tau}. \tag{4.10.1}$$

如在时间 t 进行测量，则原子仍在激发态的几率是

$$P_2(t) = 1 - \frac{t}{\tau}. \tag{4.10.2}$$

如原子确在激发态，则波函数塌缩为 ψ_2. 在时间 $2t$ 进行第二次测量，原子仍处于激发态的几率是

$$\left(1 - \frac{t}{\tau}\right)^2 \approx 1 - \frac{2t}{\tau}, \tag{4.10.3}$$

这个结果和我们没有进行第一次测量相同. 这也是可以预料的.

但如果时间 t 非常之小，情况会完全不同. $P_{2\to1}$ 不再与 t 成正比，而与 t^2 成正比：

$$P_{2\to1} \propto \alpha t^2. \tag{4.10.4}$$

对此作如下解释. 在任何标准量子力学教科书中可以在跃迁理论中找到跃迁几率的公式 $P_{2\to1} \propto \frac{\sin^2(\omega t/2)}{\omega^2}$，此处 ω 是跃迁的角频率. 作为 ω 的函数，这个表达式表示一个尖峰图，高度为 $t^2/4$，宽度为 $4\pi/t$. 这个宽度是和时间与能量间的不确定关系符合的. 对 ω 的积分给出峰下面的面积与 t 成正比，因而几率 $P_{2\to1}$ 与 t 成正比，这就导致有限的单位时间跃迁几率和 Fermi 的黄金规则. 对于非常之小的 t，图像就完全不同，出现一系列既低又宽的鼓包，就不能只对中央的峰积分，而需要对所有的 ω 积分. 结果是 $\frac{1}{4}t^2\int\rho(\omega)\mathrm{d}\omega$，$P_{2\to1}$ 就和 t^2 成正比. 在这种情况下原子在两次测量后仍处于激发态的几率为

$$(1 - \alpha t^2)^2 \approx 1 - 2\alpha t^2, \tag{4.10.5}$$

而如果不进行第一次测量时这个几率是

$$1 - \alpha(2t)^2 \approx 1 - 4\alpha t^2. \tag{4.10.6}$$

显然在属于"与二次方成正比"的短时间所进行的测量减慢了跃迁过程. 实际上在时间 0 和 T 之间进行等间隔的 n(一个大数)次测量，而 T/n 在"与二次方成正比"区域内，原子仍处于激发态的几率是

$$\left(1 - \alpha\left(\frac{T}{n}\right)^2\right)^n = \left(1 - \alpha\frac{T^2}{n}\frac{1}{n}\right)^n \xrightarrow{n\to\infty} \mathrm{e}^{-\alpha T^2/n}, \tag{4.10.7}$$

它在 $n\to\infty$ 时趋于 1，即表示一个连续被监测的激发原子根本不会衰变. 对于原子的自发辐射而言，确定它的寿命和测量次数的关系极为困难，但对受激跃迁却是可以实现的. D. J. Wineland 等人[46]实现了 R. J. Cook 原先的建议，用单一的俘获离子测量了这个依赖关系. 图 4.33 给出了能级示意图. 能级 2 与能级 1 用共振射频微扰相耦合形成相干叠加态. 测量由调谐到能级 1 到能级 3 共振的连续染料激光器进行. 在原则上观察到散射光子就能确认离子处于能级 1 之上. 假设离子在 $\tau=0$ 时处于能级 1 之上，且对它施加共振射频的 π 脉冲(时间间隔 $T=\pi/\Omega$，此处 Ω 是 Rabi 频率). 没有测量的激光脉冲时，在时间 $\tau=T$，离子位于能级 2 的几率 $P_2(T)$ 是 1. 设测量脉冲在时间 $\tau=kT/n=k\pi/(n\Omega)$ 使用，此处 $k=1,\cdots,n$. 用二能级系统的矢量表示[47]，得到 $P_2(T)$ 的表

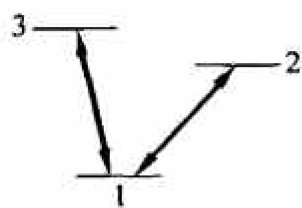


图 4.33 能级示意图

达式[46]

$$P_2(T)\approx\frac{1}{2}\left[1-\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{\pi^2}{n}\right)\right]. \tag{4.10.8}$$

因此在$n\to\infty$时$P_2(T)$趋于0. 图4.34与图4.35是[46]用$^9Be^+$离子得出作为测量脉冲数目n函数1→2和2→1跃迁几率的实验值和计算值. 可以看到实验和理论结果符合得很好.

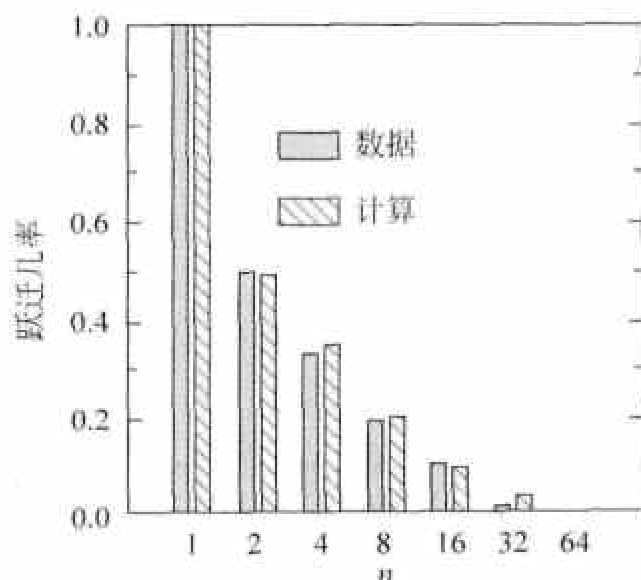


图4.34　作为测量脉冲数目函数的1→2跃迁几率. 取自[46]

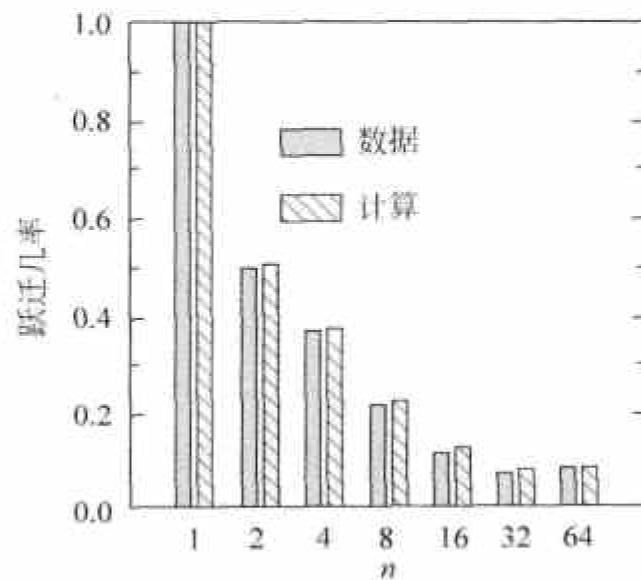


图4.35　作为测量脉冲数目函数的2→1跃迁几率. 取自[46]

L. E. Ballentine[48]一段评论显示出量子力学的一个不寻常的情况. 对于实验的推论大家都是一致的，但对于理论诠释却有着无休止的争论. Ballentine认为波函数塌缩的概念在他对量子力学的"统计诠释"[49]中是不必需的. 他用自己的诠释把观测到的效应归结于测量脉冲对离子的强扰动. 文献[46]的作者在对评论的回答[50]中说，量子力学有不同的诠释，在当前问题中用或不用波函数塌缩的概念都正确地得到同样的结果. 这样看来实验[46]既没有否定波函数塌缩的概念，但也不能作为它成立的肯定验证.

参考文献

[1] Schrödinger E. Naturwissenschften, 1926, 14: 137.
[2] Klauder J R, Skagerstam B S. Coherent States. Singapore: World Scientific, 1985.
[3] Brown L M. Am. J. Phys, 1973, 41: 525.
[4] Parker J, Stroud C R Jr. Phys Rev Lett, 1986, 56: 716.
[5] Pauli W. Z. Phys, 1926, 36: 336.
[6] Fock V A. Z. Phys, 1935, 98: 145.
[7] Bander M, Itzykson C. Rev Mod Phys, 1966, 38: 330; 1966, 38: 346.
[8] Nauenberg M. Phys Rev, 1989, A 40: 1133.
[9] Bialynicki-Birula I, Kalinski M, Eberly J H. Phys Rev Lett, 1994, 73: 1777.
[10] Kalinski M, Eberly J H, Bialynicki-Birula I. Phys Rev, 1995, A 52: 2460.
[11] Kalinski M, Eberly J H. Phys Rev, 1996, A 53: 1715.
[12] Bethe H A, Salpeter E E. Quantum Mechanics of One and Two-Electron Atoms. Berlin: Springer-Verlag, 1957.
[13] West J A, Gaeta Z D, Stroud C R Jr. Phys Rev, 1998, A 58: 186.

[14] Kalinski M, Eberly J H, West J A, Stroud C R Jr. Phys Rev, 2003, A 67: 032503.
[15] Maeda H, Gallagher T F. Phys Rev Lett, 2004, 92: 133004.
[16] Maeda H, Norum D V L, Gallagher T F. Science, 2005, 307: 1757.
[17] Gaeta Z D, Stroud C R Jr. Phys Rev, 1990, A 42: 6308.
[18] Averbuch I S, Perelman N F. Phys Lett, 1989, A 19: 449.
[19] Yeazell J H, Stroud C R Jr. Phys Rev, 1987, A 35: 2806.
[20] Alber G, Ritsch H, Zoller P. Phys Rev, 1986, A 34: 1058.
[21] Zurek W H. Phys Rev, 1980, D 24: 1516; 1982, 26: 1862.
[22] Zurek W H. Prog. Theor. Phys, 1993, 89: 281.
[23] Zurek W H. Phys. Today, 1991, 44(10): 36.
[24] von Neumann J. Mathematical Foundations of Quantum Mechanics. Princeton: Princeton University Press, 1995.
[25] Wheeler J A. In: Problems in Foundation of Physics. Toraldo di Francia, ed. Amsterdam: North Holland, 1979.
[26] Zurek W, Habib S, Paz J P. Phys Rev Lett, 1993, 70: 1187.
[27] Caldeira A O, Leggett A J. Ann Phys(N. Y.), 1983, 149: 374.
[28] Feynman R P, Vernon F L Jr. Ann Phys(N. Y.), 1963, 24: 118.
[29] Unruh W G, Zurek W H. Phys Rev, 1989, D 40: 1071.
[30] Wigner E P. Phys Rev, 1932 40: 749.
[31] Wheeler J A, Zurek W H. Quantum Theory and Measurement. Princeton: Princeton University Press, 1983.
[32] Braginsky V B, Khalili F Y. Quantum Measurement. Cambridge: Cambridge University Press, 1992.
[33] Namiki M, Pascazio S. Phys Repts, 1993, 232: 301.
[34] Letters to editors. Phys. Today, 1993, 46(4): 13, 82.
[35] Monroe C, Meekhol D M, King B E, Wineland D J. Science, 1996, 272: 1131.
[36] Monroe C, Meekhof D M, King B E, Jefferts S R, Itano W M, Wieland D J, Gould P. Phys Rev Lett, 1995, 75: 4011.
[37] Meekhof D M. Monroe C, King B E, Itano W M, Wieland D J. Phys Rev Lett, 1996, 76: 1765.
[38] Myatt C J, King B E, Turchette Q A, Sackett C A, Kilpinski D, Itano W M, Monroe C, Wineland D J. Nature, 2000, 403: 269.
[39] Brune M, Hagley E, Dreyer J, Maitre X, Maali A, Wunderlich C, Raimond J M, Haroche C. Phys Rev Lett, 1996, 76: 1796.
[40] Haroche C. Phys. Today, 1998, 51(71): 36.
[41] Friedmann J R, Patel V, Chen W, Tolpygo S K, Lukens J E. Nature, 2000, 460: 43.
[42] Rouse R, Han S, Lukens J. Phys Rev Lett, 1995, 75: 1614.
[43] Hackermüller L, Hornberger K, Brezger B, Zeilinger A, Arndt M. Nature, 2004, 427: 711.
[44] Joos E, Zeh H D. Z Phys, 1985, B 59: 223.
[45] Misra B, Sudarshan E C G. J Math Phys, 1977, 18: 756.
[46] Itano W M, Heinzen D J, Bollinger J J, Wineland D J. Phys Rev, 1990, A 41: 2295.
[47] Rabi I I, Ramsey N F, Schwinger J. Rev Mod Phys, 1954, 26: 167.
[48] Ballentine L E. Phys Rev, 1991, A 43: 5165.
[49] Ballentine L E. Rev Mod Phys, 1970, 42: 358.
[50] Itano W M, Heinzen D J, Bollinger J J, Wineland D J. Phys Rev, 1991, A 43: 5168.

第5章
路径积分方法,衰变态的瞬子方法

在 Princeton 大学 J. A. Wheeler 教授指导下进行博士论文研究时,R. P. Feynman 尝试选用去掉场的概念而只考虑带电粒子及其推迟相互作用借以摆脱量子电动力学中的无限大电子自能困难.在最初的本意上他没有成功,但却创造了与 Schrödinger,Heisenberg 和 Dirac 方法并列的一种表述量子力学的等价方法——路径积分方法.一个理论的各种等价表述在处理特定问题时是不同的.基于路径积分的瞬子方法在处理势垒隧穿以及衰变态问题上是十分有效的.第6章中的宏观量子现象以及7.6节的非 Abel 规范场的 Θ 真空都是用这个方法处理的.在非 Abel 规范场的量子化问题上路径积分提供了理想的框架(Faddeev 和 Popov).一种处理耗散系统量子力学的方法也是基于路径积分方法的(6.5节).本章致力于介绍路径积分方法.

5.1 量子力学中的路径积分方法

路径积分是 R. P. Feynman[1,2] 创立的一种量子力学的表述方法.它不用 Hilbert 空间的态矢量以及将物理量作为算符的概念,而将量子力学基本量的跃迁幅作为"对历史求和"的积分表示,称为路径积分.在路径积分中所有的量都是 c 数.对一个量子体系的所有物理信息都能从路径积分中得到.在这个表述方法中,经典力学的作用泛函起着重要作用.路径积分和统计物理中的配分函数有直接联系,因此这个方法在统计力学中也有许多应用[3].推广到量子场论是直接的.在规范场的量子化中,路径积分方法的应用使得量子化的过程变得直接明确,有力地推动了理论的发展.路径积分方法已应用到物理学许多分支的研究工作中,有许多这方面的专著已出版[4,5].

令 $|q\rangle$ 为坐标算符 $\hat{Q}$ 的本征态(Schrödinger 绘景),$|qt\rangle$ 为 Heisenberg 绘景的相应状态,相应在时间 t 与 t' 间始末态交叠的跃迁幅是

$$\langle q't' \mid qt\rangle = \left\langle q' \left| \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t'-t)\right] \right| q \right\rangle. \tag{5.1.1}$$

将时间间隔 $t'-t$ 分为 n 个等分 $\delta t = \dfrac{t'-t}{n}$,跃迁幅可写作

$$\left\langle q' \left| \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t'-t)\right] \right| q \right\rangle = \int \mathrm{d}q_1 \cdots \mathrm{d}q_{n-1} \left\langle q' \left| \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\delta t\right) \right| q_{n-1} \right\rangle$$

$$\left\langle q_{n-1}\left|\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\delta t\right)\right|q_{n-2}\right\rangle\cdots\left\langle q_1\left|\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\delta t\right)\right|q\right\rangle. \tag{5.1.2}$$

以上插入了 $n-1$ 个态的完备集：$1=\int \mathrm{d}q\mid q\rangle\langle q\mid$. 下面将式(5.1.2)中的一个矩阵元进行变换：

$$\left\langle q_2\left|\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\delta t\right)\right|q_1\right\rangle=\left\langle q_2\left|\left(1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\delta t\right)\right|q_1\right\rangle+O(\delta t^2). \tag{5.1.3}$$

Hamilton 量算符的形式为

$$\hat{H}(\hat{P},\hat{Q})=\frac{\hat{P}^2}{2m}+V(\hat{Q}),$$

它的矩阵元是

$$\begin{aligned}\langle q_2\mid\hat{H}(\hat{P},\hat{Q})\mid q_1\rangle&=\left\langle q_2\left|\frac{\hat{P}^2}{2m}\right|q_1\right\rangle+V\left(\frac{q_2+q_1}{2}\right)\delta(q_2-q_1)\\&=\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi}\langle q_2\mid p\rangle\left\langle p\left|\frac{\hat{P}^2}{2m}\right|q_1\right\rangle+V\left(\frac{q_2+q_1}{2}\right)\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(q_2-q_1)}\\&=\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(q_2-q_1)}\left[\frac{p^2}{2m}+V\left(\frac{q_2+q_1}{2}\right)\right],\end{aligned}$$

以上用了 $1=\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi}\mid p\rangle\langle p\mid$，$|p\rangle$ 的归一化是 $\langle q|p\rangle=\exp\left(\mathrm{i}\frac{p}{\hbar}q\right)$，它是算符 $\hat{P}$ 的本征态相应本征值 p. V 写成了对称化的形式. 矩阵元式(5.1.3)已求值完毕：

$$\begin{aligned}\left\langle q_2\left|\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\delta t\right)\right|q_1\right\rangle&\approx\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi}\exp\left[\mathrm{i}\frac{p}{\hbar}(q_2-q_1)\right]\left\{1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta t\left[\frac{p^2}{2m}+V\left(\frac{q_2+q_1}{2}\right)\right]\right\}\\&\approx\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi}\exp\left[\mathrm{i}\frac{p}{\hbar}(q_2-q_1)\right]\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H\left(p,\frac{q_2+q_1}{2}\right)\delta t\right].\end{aligned} \tag{5.1.4}$$

在式(5.1.4)结果中，H 已是常数函数了. 跃迁幅式(5.1.2)变为

$$\begin{aligned}\left\langle q'\left|\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t'-t)\right]\right|q\right\rangle=&\int\frac{\mathrm{d}p_1}{2\pi}\cdots\frac{\mathrm{d}p_n}{2\pi}\int\mathrm{d}q_1\cdots\mathrm{d}q_{n-1}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}\delta t\right.\\&\left.\cdot\left[p_i\left(\frac{q_i-q_{i-1}}{2}\right)-H\left(p_i,\frac{q_i+q_{i-1}}{2}\right)\right]\right\}.\end{aligned} \tag{5.1.5}$$

在式(5.1.2)中有 n 个因子，故有 n 个积分变量 p，而在间隔中插了 $n-1$ 个完备集，故有 $n-1$ 个积分变量 q. 式(5.1.5)可以形式地写出(取 $n\to\infty$)

$$\left\langle q'\left|\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t'-t)\right]\right|q\right\rangle=\int\left[\frac{\mathrm{d}q\mathrm{d}p}{2\pi}\right]\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_t^{t'}\mathrm{d}t[p\dot{q}-H(p,q)]\right\}. \tag{5.1.6}$$

在式(5.1.5)的积分中，对 p_i 的部分可以利用 Gauss 积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x}{2\pi}\mathrm{e}^{-ax^2+bx}=\frac{1}{\sqrt{4\pi a}}\mathrm{e}^{b^2/4a}$$

求出

$$\int\frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi}\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{2m\hbar}\delta t p_i^2+\mathrm{i}\frac{p_i}{\hbar}(q_i-q_{i-1})\right]=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\delta t}\right)^{1/2}\exp\left[\frac{\mathrm{i}m(q_i-q_{i-1})^2}{2\hbar\delta t}\right],$$

此处将积分公式中的系数作为虚数使用，可以理解为对虚时间作解析延拓. 上式的指数因子和余下的因子重新合并为

$$\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta t\left[\frac{m}{2}\left(\frac{q_i-q_{i-1}}{\delta t}\right)^2-V\left(\frac{q_i+q_{i-1}}{2}\right)\right].$$

式(5.1.5)就可以写作

$$\begin{aligned}
&\left\langle q'\left|\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t'-t)\right]\right|q\right\rangle\\
&=\lim_{n\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\,\hbar\delta t}\right)^{\frac{n}{2}}\int\prod_{i}^{n-1}\mathrm{d}q_i\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}\delta t\left[\frac{m}{2}\left(\frac{q_i-q_{i-1}}{\delta t}\right)^2-V(q_i)\right]\right\}\\
&\equiv N\int[Dq]\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_t^{t'}\mathrm{d}\tau\left[\frac{m}{2}\dot{q}^2-V(q)\right]\right)\\
&=N\int[Dq]\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_t^{t'}\mathrm{d}\tau L(q\dot{q})\right]\\
&=N\int[Dq]\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S\right).
\end{aligned}\tag{5.1.7}$$

在式(5.1.7)中归一化常数 N 及测度$[Dq]$的乘积的定义包含在第一个等号右方的极限中.这实际上是一个无穷维积分.$L(q\dot{q})$是轨道 $q(t)$的 Lagrange 量,S 是轨道的作用量,定义都包含在式中.跃迁幅的诠释是:它是从(q,t)到(q',t')的不同"历史"(即所有可能的轨道)的和(见图 5.1).求和的权重是个相因子,相位是 S/h,S 也就是这个"历史"的作用量.每一个积分变量 q_i 是在时间 t_i 的粒子可能坐标,即相应不同历史在 t_i 时的 q 值(图中 t_i 处的直线与不同轨道的交点).从式(5.1.7)可以看出路径积分表达方式与经典力学间的对应是明显的.在很多可能的历史中,有一个历史是特殊的,它就是使作用量取极值的经典轨道.和经典力学不同处是,其他轨道也是可能的,它们也有自己的权重函数(相因子)共同参与在求和中.这些都在以下的发展以及例中得到阐明.

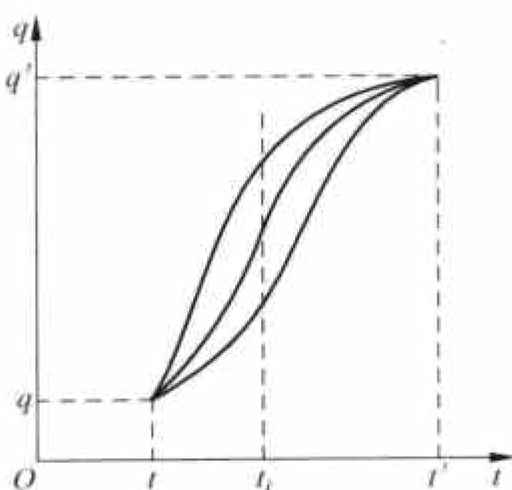


图 5.1 从(q,t)到(q',t')的不同历史

解能量本征函数及本征值问题在路径积分中如何表现呢?记$\hat{H}$的本征态为$|n\rangle$,相应本征值 E_n,即有

$$\hat{H}\mid n\rangle=E_n\mid n\rangle.\tag{5.1.8}$$

跃迁幅$\langle x_f t_f|x_i t_i\rangle$是

$$\langle x_f t_f\mid x_i t_i\rangle=\sum_n\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_n}{\hbar}t\right)\langle x_f\mid n\rangle\langle n\mid x_i\rangle,\tag{5.1.9}$$

此处 $t=t_f-t_i$.当对具体问题求出跃迁幅的路径积分后,通过和式(5.1.9)右方相比就能得到 E_n 和 $\psi_n=\langle x|n\rangle$.在下面的谐振子例中将给出这个计算的概要.如果只求最低态,则可过渡到虚时间

$$t\equiv-\mathrm{i}\tau,\tag{5.1.10}$$

此时跃迁幅变为

$$\left\langle x_f\left|\exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right)\right|x_i\right\rangle=\sum_n\exp\left(-\frac{E_n}{\hbar}\tau\right)\langle x_f\mid n\rangle\langle n\mid x_i\rangle,\tag{5.1.11}$$

计算出路径积分后,可将结果用 τ 展开,将展开和式(5.1.11)右方比较,就能得到低能量本征值和相应的本征函数.

现在讨论路径积分的计算. 考虑质量 $m=1$ 的粒子. Lagrange 量是

$$L=\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2-V(x), \tag{5.1.12}$$

作用量是

$$S=\int_{t_i}^{t_f}L\left(x,\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)\mathrm{d}t. \tag{5.1.13}$$

在欧氏时空中($x,\tau=\mathrm{i}t$),路径积分中的相因子是

$$\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t)]\right)=\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_{\tau_i}^{\tau_f}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2+V(x)\right]\mathrm{d}\tau\right\}\equiv\exp\left(-\frac{1}{\hbar}S_{\mathrm{E}}\right), \tag{5.1.14}$$

此处欧氏作用量 S_{E} 是

$$S_{\mathrm{E}}=\int_{\tau_i}^{\tau_f}\left[\frac{1}{2}\dot{x}^2+V(x)\right]\mathrm{d}x, \tag{5.1.15}$$

$\dot{x}$ 是 $\mathrm{d}x/\mathrm{d}\tau$ 的缩写. 在以下的讨论中略去下标 E. 要计算的跃迁幅是

$$\left\langle x_f\left|\exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right)\right|x_i\right\rangle=N\int[Dx]\mathrm{e}^{-S/\hbar}, \tag{5.1.16}$$

作用量的始末态坐标为

$$x_i=x(\tau_i),\quad x_f=x(\tau_f). \tag{5.1.17}$$

路径积分式(5.1.16)主要贡献来自给出最小作用量 S_0 的轨道,即经典轨道,记为 $X(\tau)$. 远离经典轨道的轨道对路径积分贡献很小,可以略去. 记其他满足条件式(5.1.17)的可能的邻近轨道为 $x(\tau)$,将 $x(\tau)$ 用经典轨道 $X(\tau)$ 及对它的偏离 $\delta x(\tau)$ 表示:

$$x(\tau)=X(\tau)+\delta x(\tau). \tag{5.1.18}$$

将 $\delta x(\tau)$ 用一正交归一完备集 $x_n(\tau)$ 展开,式(5.1.18)可写作

$$x(\tau)=X(\tau)+\sum_n c_n x_n(\tau). \tag{5.1.19}$$

$[Dx]$ 可以写为

$$[Dx]=\prod_n\frac{\mathrm{d}c_n}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \tag{5.1.20}$$

数值因子直到归一因子取确定值以前没有特殊意义. 下面要证明的是,路径积分式(5.1.16)和 $\mathrm{e}^{-S_0/\hbar}$ 成正比,此处 S_0 就是经典轨道的作用量,比例因子称前置因子(prefactor),由偏离经典轨道的所有轨道提供贡献. 将任意轨道的作用量泛函 $S[x(\tau)]$ 用经典作用量 S_0 和各阶变分表示:

$$\begin{aligned}S[x(\tau)]&=\int_{\tau_i}^{\tau_f}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2+V(x)\right]\mathrm{d}\tau\\&=S[X(\tau)+\delta x(\tau)]=S[X(\tau)]+\delta S+\delta^2 S+\cdots\end{aligned} \tag{5.1.21}$$

$S[X(\tau)]$ 就是经典作用量 S_0. $S[x(\tau)]-S[X(\tau)]$ 取到 δx 一阶就是 δS,二阶量给出 $\delta^2 S$ 等. 考虑到关系

$$V(x)-V(X)=V'(X)\delta x+\frac{1}{2}V''(X)(\delta x)^2,$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\tau}+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\delta x\right)^2-\left(\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\tau}\right)^2=2\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\tau}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\delta x+\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\delta x\right)^2,$$

以及上式右方在积分$\int \mathrm{d}\tau$下作分部积分，并用边界条件$\delta x(\tau_f)=\delta x(\tau_i)=0$所导致的

$$2\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\tau}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\delta x \to -2\frac{\mathrm{d}^2X}{\mathrm{d}\tau^2}\delta x,$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\delta x\right)^2 \to -\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}\delta x\right)\delta x^{①},$$

最后得

$$\delta S=\int_{\tau_i}^{\tau_f}\mathrm{d}\tau\left[-\frac{\mathrm{d}^2X}{\mathrm{d}\tau^2}+V'(X)\right]\delta x. \tag{5.1.22}$$

最小作用的要求$\delta S=0$给出

$$-\frac{\mathrm{d}^2X}{\mathrm{d}\tau^2}+V'(X)=0. \tag{5.1.23}$$

这就是作用量(见式(5.1.21))为极值的 Euler-Lagrange 方程，即经典轨道满足的方程．由于$\delta S=0$，就有

$$S=S_0+\delta^2S, \tag{5.1.24}$$

$$\delta^2S=\int_{\tau_i}^{\tau_f}\left[-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}\delta x+\frac{1}{2}V''(X)\delta x\right]\delta x\,\mathrm{d}\tau. \tag{5.1.25}$$

δ^2S是由偏离经典轨道给出的贡献．为了求出δ^2S，需要对式(5.1.19)中的x_n给以具体规定．令它的本征方程为

$$\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(X)\right]x_n=\lambda_n x_n, \tag{5.1.26}$$

边界条件为

$$x_n(\tau_i)=x_n(\tau_f)=0,$$

正交归一化条件是

$$\int_{\tau_i}^{\tau_f}x_m(\tau)x_n(\tau)\mathrm{d}\tau=\delta_{mn}.$$

将$\delta x=\sum c_n x_n$代入式(5.1.25)并用正交归一条件和式(5.1.26)，得

$$\begin{aligned}\delta^2S&=\int\mathrm{d}\tau\sum_{m,n}c_m x_m\left[-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+\frac{1}{2}V''(X)\right]c_n x_n\\&=\sum_{mn}\frac{1}{2}\lambda_n c_m c_n\delta_{mn}=\frac{1}{2}\sum_n c_n^2\lambda_n.\end{aligned} \tag{5.1.27}$$

路径积分式(5.1.16)已经算出：

$$\begin{aligned}\left\langle x_f\left|\exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right)\right|x_i\right\rangle&=N\int[Dx]\mathrm{e}^{-S/\hbar}=N\mathrm{e}^{-S_0/\hbar}\int\prod_n\frac{\mathrm{d}c_n}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\delta^2S/\hbar}\\&=N\mathrm{e}^{-S_0/\hbar}\int\prod_n\frac{\mathrm{d}c_n}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{1}{2\hbar}\sum c_n^2\lambda_n\right)\\&=N\left(\prod_n\lambda_n^{-\frac{1}{2}}\right)\mathrm{e}^{-S_0/\hbar}.\end{aligned} \tag{5.1.28}$$

上面最后一步是用了 Gauss 积分公式．由于λ_n正是算符$-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(X)$的本征值，因此有

① 这一项对δ^2S有贡献．

$$\prod_n \lambda_n^{-\frac{1}{2}} = [\det(-\partial_\tau^2 + V''(X))]^{-1/2}. \tag{5.1.29}$$

式(5.1.28)可改写为

$$\left\langle x_f \left| \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right) \right| x_i \right\rangle = N[\det(-\partial_\tau^2 + V''(X))]^{-1/2} e^{-S_0/\hbar}. \tag{5.1.30}$$

这是准到二阶变分的结果. 更高阶的结果给出 $O(\hbar)$ 的修正,即

$$\left\langle x_f \left| \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right) \right| x_i \right\rangle = N[\det(-\partial_\tau^2 + V''(X))]^{-1/2} e^{-S_0/\hbar}(1 + O(\hbar))$$

作为简单的例子,考虑抛物线势(见图 5.2). 选边界条件 $x_i = x_f = 0$. 因此经典轨道是 $X(\tau) = 0$,经典作用量是 $S_0 = 0$. 记 $V''(X(\tau)) = V''(X=0)$ 为 ω^2,有

$$\left\langle x_f \left| \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right) \right| x_i \right\rangle$$
$$= N[\det(-\partial_\tau^2 + \omega^2)]^{-1/2} e^{-S_0/\hbar}(1 + O(\hbar)).$$

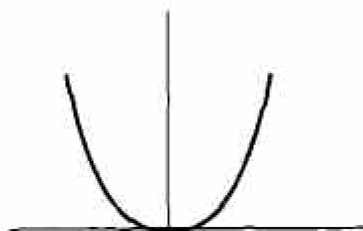


图 5.2 抛物线势

以下将要证明,对于 $\tau_i = -\tau_0/2, \tau_f = \tau_0/2$ 以及 τ 值很大时,有

$$\left\langle 0 \left| \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right) \right| 0 \right\rangle = N[\det(-\partial_\tau^2 + \omega^2)]^{-1/2} = \left(\frac{\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2} e^{-\omega\tau_0/2}. \tag{5.1.31}$$

将式(5.1.31)和式(5.1.11)右方相比,就得到基态 $|0\rangle$ 的本征值和零点波函数:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega(1 + O(\hbar)),$$

$$\langle x = 0 \mid 0\rangle = \left(\frac{\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(1 + O(\hbar)).$$

下面根据文献[6]的附录给出式(5.1.31)的证明. 考虑微分方程

$$(-\partial_\tau^2 + W(\tau))\psi = \mu\psi, \tag{5.1.32}$$

此处 $W(\tau)$ 是 τ 的有界函数,μ 是参数. 令 $\psi_\mu(\tau)$ 为式(5.1.32)的解,且满足边界条件①

$$\psi_\mu(-\tau_0/2) = 0, \quad \partial_\tau\psi_\mu(-\tau_0/2) = 1. \tag{5.1.33}$$

算符 $(-\partial_\tau^2 + W(\tau))$ 的本征值为 λ_n,它相应的本征函数满足边界条件

$$\psi_{\lambda_n}\left(-\frac{\tau_0}{2}\right) = \psi_{\lambda_n}\left(\frac{\tau_0}{2}\right) = 0.$$

可改写式(5.1.29)为

$$\det(-\partial_\tau^2 + W(\tau)) = \prod_n \lambda_n. \tag{5.1.34}$$

令 $W^{(1)}$ 和 $W^{(2)}$ 为两个不同的 τ 的函数,并令 $\psi_\mu^{(1)}$ 和 $\psi_\mu^{(2)}$ 为式(5.1.32)的相应的解.

考虑以下的表达式:

$$\frac{\det(-\partial_\tau^2 + W^{(1)} - \mu)}{\det(-\partial_\tau^2 + W^{(2)} - \mu)} = \frac{\psi_\mu^{(1)}(\tau_0/2)}{\psi_\mu^{(2)}(\tau_0/2)}, \tag{5.1.35}$$

左方是复变量 μ 的半纯函数②,在每一个 $\mu = \lambda_n^{(1)}$ 处有一个单纯的零,在每一个 $\mu = \lambda_n^{(2)}$ 处有一个单纯的极点,这些 λ 都是正实数. 除在正实轴上以外,函数是到处解析的. 在复平面任何

① 注意这是和式(5.1.26)不同的问题. 由于边界条件不同,它对任意 μ 参数的值都有解,而式(5.1.26)仅对本征值 λ_n 有解.

② 复变函数仅有极点作为奇点时,称为半纯函数.

方向(正实轴除外)取极限 $\mu\to\infty$,函数趋于极限1.对于一个在一定区域内的解析函数,而它的值(沿一个在此区域内的连续曲线上)是一个常数,则它在整个区域内的值就等于这个常数.因此式的右方除在正实轴上以外都等于1.定义 N:

$$\frac{\det(-\partial_\tau^2+W)}{\psi_0(\tau_0/2)}=\pi\hbar N^2,\tag{5.1.36}$$

因为对于 $\mu=0$,式的左方根据式(5.1.35)与 W 无关,N 一定是个常数.因此我们有:

$$N[\det(-\partial_\tau^2+W^{(1)})]^{-1/2}=[\pi\hbar\psi_0(\tau_0/2)]^{-1/2}\tag{5.1.37}$$

这个关系对于任何有界的函数 $W(\tau)$和相应的解 Ψ_μ 在 $\mu=0$ 时都适用.

回到谐振子问题,$W=\omega^2$,是常数,满足式(5.1.32)和式(5.1.33)的解 ψ_0 是

$$\psi_0(\tau)=\frac{1}{\omega}\sinh\omega\left(\tau+\frac{\tau_0}{2}\right).\tag{5.1.38}$$

现在 $\psi_0\left(\frac{\tau_0}{2}\right)=\frac{1}{\omega}\sinh\omega\frac{\tau_0}{2}$,对于谐振子式(5.1.37)就是:

$$N[\det(-\partial_\tau^2+\omega^2)]^{-1/2}=\left(\frac{\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2}e^{-\omega\tau_0/2},$$

式(5.1.31)得证.

前置因子的另一种算法见附录3

Minkowski 时空对普遍的跃迁幅计算的概要①计算的路径积分是

$$\langle x_bt_b\mid x_at_a\rangle=\int[Dx]\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\equiv\exp\left(\frac{i}{\hbar}S_0\right)F_\omega(t_b-t_a),\tag{5.1.39}$$

式中

$$S=\int_{t_a}^{t_b}\frac{m}{2}(\dot{x}^2-\omega^2x^2)\mathrm{d}t.\tag{5.1.40}$$

经典轨道方程是

$$\ddot{x}=-\omega^2x,\tag{5.1.41}$$

满足边界条件的解是

$$X(t)=\frac{x_b\sin\omega(t-t_a)+x_a\sin\omega(t_b-t)}{\sin\omega(t_b-t_a)}.\tag{5.1.42}$$

S_0 容易求得,但 F_ω 的计算比较复杂.结果是

$$\langle x_bt_b\mid x_at_a\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi i\hbar/m}}\sqrt{\frac{\omega}{\sin\omega(t_b-t_a)}}\cdot\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin\omega(t_b-t_a)}[(x_b^2+x_a^2)\cos\omega(t_b-t_a)-2x_bx_a]\right\}\tag{5.1.43}$$

路径积分可以用$\hat{H}$的本征函数,本征值表示为

$$\langle x_bt_b\mid x_at_a\rangle=\sum_n\psi_n(x_b)\psi_n^*(x_a)e^{-iE_n(t_b-t_a)/\hbar},\tag{5.1.44}$$

将它与式(5.1.43)比较就能得到本征函数和本征值.为此要用 Mehler 公式②

$$\frac{1}{\sqrt{1-a^2}}\exp\left[-\frac{1}{1-a^2}(x^2+x'^2-2xx'a)\right]$$

① 参阅文献[2] § 2.4, § 9.3.

② 见 Morse P M, Feshbach H. Method of Theoretical Physics, Vol. I. New York: McGraw Hill, 1953, p. 781.

$$= e^{-x^2-x'^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{2^n n!}H_n(x)H_n(x'),$$

此处 $H_n(x)$是 Hermite 多项式. 令 $a=e^{-i\omega(t_b-t_a)}$, $x=\frac{x_b}{\lambda}$, $x'=\frac{x_a}{\lambda}$, $\lambda=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, 用 Mehler 公式变换式(5.1.43), 并和式(5.1.44)比较, 得

$$\begin{aligned}\psi_n(x) &= N_n\lambda^{-1/2}e^{-x^2/2\lambda^2}H_n(x/\lambda),\\ N_n &= (2^n n!\sqrt{\pi})^{-1/2},\\ E_n &= \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right).\end{aligned}\tag{5.1.45}$$

和解 Schrödinger 方程的结果完全一样.

5.2 瞬子与双阱中能级的相干劈裂

考虑图 5.3(a)所示的双势阱. 势对坐标 x 是对称的, 即

$$V(-x) = V(x).\tag{5.2.1}$$

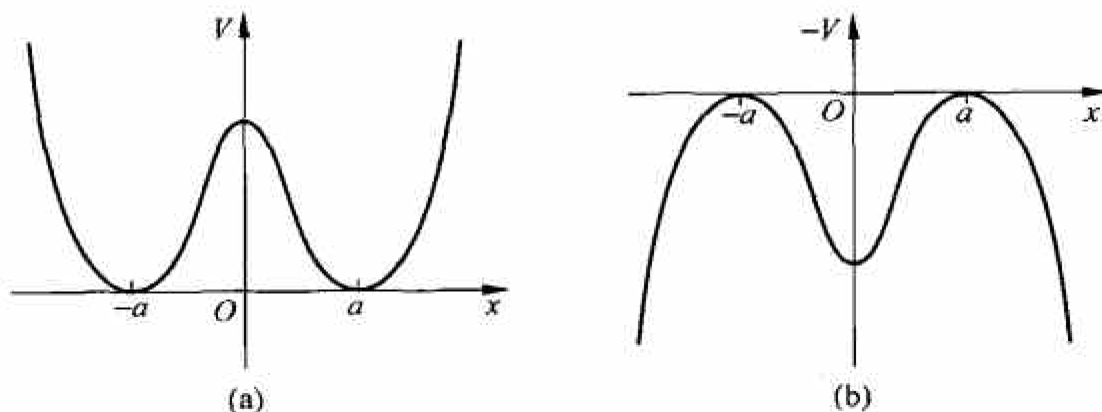


图 5.3 双势阱(a)及其力学模拟(b)

抛物线在 $x=\pm a$ 处为 0(极小值), 并有 $V''(\pm a)=\omega^2$. 经典轨道的运动方程(欧氏时空)由式(5.2.1)给出:

$$\frac{d^2X}{d\tau^2} = V'(X).$$

将它与 Minkowski 时空的运动方程($m=1$)

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -V'(x)$$

比较, 可以把 X 在虚时间 τ 的运动和一个经典粒子在势 $-V$ 中实时间运动相比拟(图 5.2(b)). 这样就可以利用经典力学的概念来定性地分析经典轨道. 这种方法称为力学模拟. 从双阱势的力学模拟分析, 有两种简单的经典轨道: ①对所有的 τ 值, $X(\tau)=-a$ 或 $X(\tau)=a$; ②$X\left(-\frac{\tau}{2}\right)=-a$, $X\left(\frac{\tau}{2}\right)=a$, $\tau\to\infty$ 或 $X\left(-\frac{\tau}{2}\right)=a$, $X\left(\frac{\tau}{2}\right)=-a$, $\tau\to\infty$. 在路径积分中要计算的跃迁幅是

$$\left\langle -a\left|\exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right)\right|-a\right\rangle = \left\langle a\left|\exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right)\right|a\right\rangle,\tag{5.2.2}$$

和

$$\left\langle a \left| \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right) \right| -a \right\rangle = \left\langle -a \left| \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right) \right| a \right\rangle. \tag{5.2.3}$$

考虑第二类解，由于 $\tau\to\infty$，从力学模拟分析，粒子在 $x=\pm a$ 时速度为 0，因此势能动能都为 0，是零能量解：$\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2-V=0$. 对路径积分经典解这相当于

$$\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\tau} = \sqrt{2V}, \tag{5.2.4}$$

它的解是

$$\tau = \tau_c + \int_0^X \mathrm{d}x'(2V(x'))^{-1/2}. \tag{5.2.5}$$

τ_c 是 $X=0$ 相应的虚时间，是个任意的积分常数. 图 5.4 给出解(5.2.5)，它称为"以 τ_c 为中心的瞬子"，也称扭折解(kink). 瞬子(instanton)在数学结构上与场论中粒子状的解"孤子"很类似，所以称为"子"(-on). 由于它在很长的(虚)时间都位于 $-a$ 或 $+a$，只在一瞬间离开 $\pm a$ 而从 $X=0$ 处掠过，故名"瞬子". 这一"瞬"是可以估计的. 在 $\tau\to\infty$，$X\approx a$ 时 V 可以写为 $\frac{1}{2}\omega^2(a-X)^2$，从式(5.2.4)得 $\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\tau}\approx\omega(a-X)$，解为 $a-X=\mathrm{e}^{-\omega\tau}$. 因此，只在 $1/\omega$ 这一瞬间 X 才明显远离 a. $X(-\infty)=a$，$X(+\infty)=-a$ 的解称为反瞬子. 从式(5.2.4)可以得出瞬子(反瞬子)的经典作用量

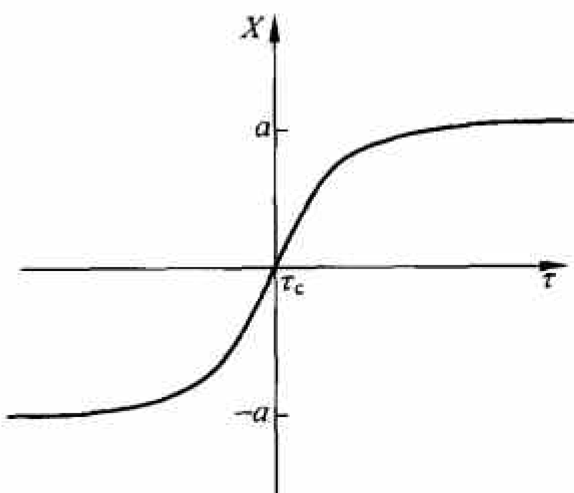


图 5.4　瞬子解

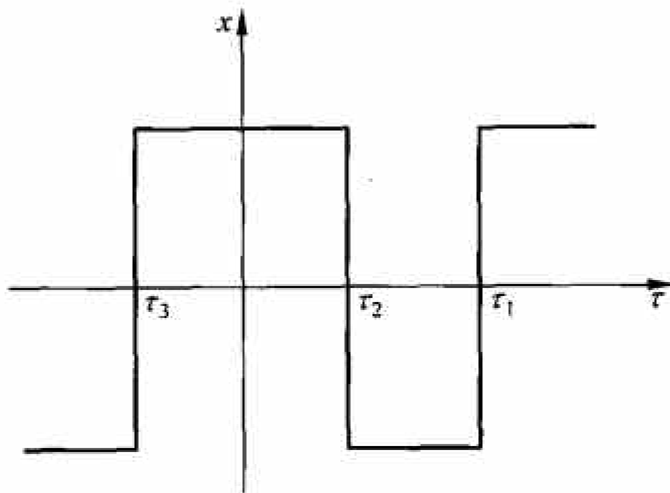


图 5.5　瞬子-反瞬子系列

$$S_0 = \int \mathrm{d}\tau\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 + V\right] = \int \mathrm{d}\tau\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau}\right)^2 = \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x\,\sqrt{2V}. \tag{5.2.6}$$

由于在虚时间$(-\infty,\infty)$之间 $1/\omega$ 是个可忽略的量(一瞬)，因此瞬子(反瞬子)并不是唯一的近似经典解. 由一系列瞬子-反瞬子连接而成的也是近似经典解. 图 5.5 给出这个系列，$\tau_1,\tau_2,\cdots$为各个瞬子(反瞬子)的中心. 在图上 $1/\omega$ 取为 0. 对 n 个瞬子-反瞬子系列经典作用量是 nS_0，因为根据式(5.2.6)，瞬子的作用主要来自 $X\approx0$ 的那一瞬. 路径积分前置因子 $[\det(-\partial_\tau^2+V''(X))]^{-1/2}$ 的计算涉及问题较多. 如果没有 $\tau_1,\tau_2,\cdots$这些瞬间，粒子位于 $+a$ 或 $-a$，在那里 $V''=\omega^2$，因此结果和谐振子(式(5.1.31))一样，即 $\left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\omega\tau_0/2}$. 令单瞬子对前置因子的修正为因子 K(下面计算)，则 n 个瞬子-反瞬子的前置因子应该是

$$\left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\omega\tau_0/2}K^n. \tag{5.2.7}$$

由于 $\tau_1,\tau_2,\cdots$ 的位置是任意的，对所有的经典轨道求和也涉及对这些位置的积分. 由于被积分函数与 $\tau_1,\cdots,\tau_2$ 的位置无关，因此有

$$\int_{-\tau_0/2}^{\tau_0/2} d\tau_1 \int_{-\tau_0/2}^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_{-\tau_0/2}^{\tau_{n-1}} d\tau_n = \frac{\tau_0^n}{n!}. \tag{5.2.8}$$

还有一个细节是，如 $X\left(-\frac{\tau_0}{2}\right)=X\left(\frac{\tau_0}{2}\right)$，则应取偶数的瞬子-反瞬子；如 $X\left(-\frac{\tau_0}{2}\right)=-X\left(\frac{\tau_0}{2}\right)$，则应取奇数个. 例如

$$\begin{aligned}\left\langle -a \left| \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau_0\right) \right| a \right\rangle &= \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\omega\tau_0/2} \sum_{n(\text{odd})} \frac{K^n e^{-nS_0/\hbar}\tau_0^n}{n!} \\ &= \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\omega\tau_0/2}\, \frac{1}{2}[\exp(Ke^{-S_0/\hbar}\tau_0) \\ &\quad - \exp(-Ke^{-S_0/\hbar}\tau_0)],\end{aligned} \tag{5.2.9}$$

$$\begin{aligned}\left\langle -a \left| \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau_0\right) \right| -a \right\rangle &= \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\omega\tau_0/2} \sum_{n(\text{even})} \frac{K^n e^{-nS_0/\hbar}\tau_0}{n!} \\ &= \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\omega\tau_0/2}\, \frac{1}{2}[\exp(Ke^{-S_0/\hbar}\tau_0) \\ &\quad + \exp(-Ke^{-S_0/\hbar}\tau_0)].\end{aligned} \tag{5.2.10}$$

和式(5.1.11)相比，看出 $\hat{H}$ 的本征值是

$$E_\pm = \frac{1}{2}\hbar\omega \pm \hbar K e^{-S_0/\hbar}, \tag{5.2.11}$$

相应的本征态 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$（激发态和基态）与 $|a\rangle$ 和 $|-a\rangle$ 的内积为

$$\begin{aligned}|\langle +|\pm a\rangle|^2 = |\langle -|\pm a\rangle|^2 &= \langle a|-\rangle\langle -|-a\rangle = -\langle a|+\rangle\langle +|-a\rangle \\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}.\end{aligned} \tag{5.2.12}$$

基态 $|-\rangle$ 是 $|a\rangle$ 与 $|-a\rangle$ 的偶组合，激发态是它们的奇组合. 以上的结果可以从

$$\left\langle + \left| \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau_0\right) \right| + \right\rangle = \exp\left(-\frac{E_+}{\hbar}\tau_0\right) = e^{-\omega_0\tau_0/2}\exp(-Ke^{-S_0/\hbar}\tau_0), \tag{5.2.13}$$

$$\left\langle - \left| \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau_0\right) \right| - \right\rangle = \exp\left(-\frac{E_-}{\hbar}\tau_0\right) = e^{-\omega_0\tau_0/2}\exp(Ke^{-S_0/\hbar}\tau_0), \tag{5.2.14}$$

两个要求得到.

上面实现的实际是二能级体系的相干劈裂. 如果双阱中间的峰是无限高，则两个阱中分别的基态是简并的. 但峰是有限的，左右阱中的基态能通过隧穿而混合，因而 $|+\rangle$ 与 $|-\rangle$ 就有能量差 $2\hbar Ke^{-S_0/\hbar}$. 隧穿因子 $e^{-S_0/\hbar}$ 的出现是自然的. 由于本征态是左右两阱基态的相干叠加，这个劈裂称相干劈裂.

以下计算单个瞬子的前置因子 K. 令 $X(\tau,\tau_c)$ 代表中心在 τ_c 的瞬子解. 将 τ_c 移动小量 $\delta\tau_c$ 的解与原解之差为

$$X(\tau,\tau_c) - X(\tau,\tau_c+\delta\tau_c) = -\frac{\partial}{\partial\tau_c}X(\tau,\tau_c)\delta\tau_c = \frac{\partial}{\partial\tau}X(\tau,\tau_c)\delta\tau_c.$$

最后一步是因为移动 τ_c 和反方向移动 τ 的原点等价. 由于移动解并不变更作用量，因此从

式(5.1.25)得到

$$\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(X)\right]\delta X=0,$$

即

$$\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(X)\right]\frac{\partial}{\partial\tau}X(\tau,\tau_c)=0. \tag{5.2.15}$$

从此得到结论，$\frac{\partial X}{\partial\tau}$是算符$\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(X)\right]$的本征函数，相应本征值为0，称零模解. 记 x_0 为归一的零模解①

$$x_0=C\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\tau},$$

归一条件是

$$1=C^2\int\mathrm{d}\tau\left(\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\tau}\right)^2=C^2S_0. \tag{5.2.16}$$

式(5.2.16)最后一步的根据是式(5.2.6). 因此有

$$x_0=(S_0)^{-1/2}\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\tau}. \tag{5.2.17}$$

在将任意解 $x(\tau)$在 $X(\tau)$附近展开时，有

$$x(\tau)=X(\tau)+c_0x_0+\sum_{n=1}c_nx_n, \tag{5.2.18}$$

面对 c_0 积分会给出 $\lambda_0^{-1/2}$，而 $\lambda_0=0$. 不过实际上对 c_0 积分等价于对 τ_c 的积分，而对 τ_c 的积分已经在上面对瞬子中心位置的积分式(5.2.8)作过了. 现在只需找出等价的比例因子即可. 变化 $\mathrm{d}\tau_c$ 时 $x(\tau)$的变化是

$$\mathrm{d}x(\tau)=-\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\tau}\mathrm{d}\tau_c=-S_0^{1/2}x_0\mathrm{d}\tau_c,$$

而变化 c_0 带来的是

$$\mathrm{d}x(\tau)=x_0\mathrm{d}c_0.$$

二者相比给出

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{d}c_0=\sqrt{\frac{S_0}{2\pi\hbar}}\mathrm{d}\tau_c. \tag{5.2.19}$$

这样，单子瞬子对路径积分的贡献已全部算出：

$$\left\langle a\left|\exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau_0\right)\right|-a\right\rangle_1=N\tau_0\left(\frac{S_0}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-S_0/\hbar}\det{}'\left[-\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}+V''(X)\right]^{-\frac{1}{2}}. \tag{5.2.20}$$

det 上的撇号“′”代表不包括零本征值，而对$\frac{\mathrm{d}c_0}{\sqrt{2\pi\hbar}}$的积分已被 $\tau_0\left(\frac{S_0}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}$ 取代了. 将式(5.2.9)中一个瞬子的贡献抽出，

$$\left\langle a\left|\exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau_0\right)\right|-a\right\rangle_1=\left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\omega\tau_0/2}K\mathrm{e}^{-S_0/\hbar}\tau_0,$$

---

① 以下不涉及 τ_c 的变化，X 只是 τ 的函数. 在讨论零模解时就用$\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\tau}$.

并考虑谐振子的前置因子(式(5.1.35))

$$N\det\left[-\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}+\omega^2\right]^{-1/2}=\left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\omega\tau_0/2},$$

就得出

$$K=\left(\frac{S_0}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{\det\left(-\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}+\omega^2\right)}{\det'\left(-\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}+V''(X)\right)}\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{5.2.21}$$

从量子力学的通常表述(用 WKB 法解 Schrödinger 方程)所得结果与以上 K 的计算是符合的,可参阅文献[6]附录 B.

上文中提到,路径积分的计算(指数上的经典作用量,二级变分给出的前置因子)相当于半经典近似. 式(5.2.11)中对能量 $\frac{1}{2}\hbar\omega$ 的修正 $\hbar K\mathrm{e}^{-S_0/\hbar}$ 包含一个指数因子. 半经典近似的结果只在 $O(\hbar)$ 情况才有意义. 当 $S_0\gg\hbar$ 时,修正项会比 $O(\hbar^2)$ 还小. 保留它是否有意义呢? 作为修正项,它没有意义,但作为 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 的劈裂,它是带头项,因此是有意义的.

本节内容可参阅文献[6].

5.3 密度矩阵与路径积分

考虑量子算符 $\hat{K}$,它的分立本征态 $\{|k_n\rangle\}$ 组成正交归一完备集. 一个量子体系的波函数 $|\psi\rangle$ 可以展开成这个集合的线性叠加:

$$|\psi\rangle=\sum c_n\,|\,k_n\rangle. \tag{5.3.1}$$

展开系数 c_n 满足条件 $\sum|c_n|^2=1$. $|c_n|^2$ 是状态 $|\psi\rangle$ 位于本征态 $|k_n\rangle$ 的几率. 叠加式(5.3.1)包含的信息比以上的陈述要更多,因为复系数 $\{c_n\}$ 包含了相干叠加中各项之间的相对相位. 这样的态 $|\psi\rangle$ 是纯态. 如果我们只知道量子体系的状态处于本征态 $|k_n\rangle$ 的几率,即 $\{w_n=|c_n|^2\}$,此处 $w_n\leqslant 1$,是实数,并有 $\sum\limits_n w_n=1$. 当不为零的 w_n 数目大于 1 时,状态就是统计混合态. 密度矩阵

$$\boldsymbol{\rho}=\sum w_n\,|\,k_n\rangle\langle k_n\,|, \tag{5.3.2}$$

就是描述统计混合态的有效方法. $\boldsymbol{\rho}$ 可以看做是一个对角矩阵,矩阵元为 $\rho_{nm}=w_n\delta_{nm}$①. 条件 $\sum w_n=1$ 给出,则

$$\mathrm{tr}\boldsymbol{\rho}=1. \tag{5.3.3}$$

密度矩阵是厄密的:

$$\boldsymbol{\rho}^\dagger=\boldsymbol{\rho}. \tag{5.3.4}$$

我们来计算 $\boldsymbol{\rho}^2$:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\rho}^2&=\sum_{m,n}w_nw_m\,|\,k_n\rangle\langle k_n\,|\,k_m\rangle\langle k_m\,|\\&=\sum_n w_n^2\,|\,k_n\rangle\langle k_n\,|.\end{aligned} \tag{5.3.5}$$

---

① 在我们选定的表示中 $\boldsymbol{\rho}$ 是对角的. 变换表示可以使它变为非对角的.

这里用了本征态的正交性:$\langle k_n | k_m \rangle = \delta_{nm}$. 一般情况下 $\sum w_n = 1$ 意味着 $w_n^2 < w_n$,除非只有一个系数 $w_l = 1$ 而其他系数都为零. 一般情况下有

$$\mathrm{tr}\boldsymbol{\rho}^2 < \mathrm{tr}\boldsymbol{\rho}, \tag{5.3.6a}$$

而在特殊情况下

$$\boldsymbol{\rho}^2 = \boldsymbol{\rho}. \tag{5.3.6b}$$

这个特殊情况是 $\boldsymbol{\rho} = |k_l\rangle\langle k_l|$,它相当于 $|\psi\rangle = |k_l\rangle$,是个纯态. 在此情况下

$$\boldsymbol{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|. \tag{5.3.7}$$

因此式(5.3.6a)是统计混合态的条件,而式(5.3.6b)是纯态的条件. 密度矩阵是描述量子体系的灵活方法,不论它处于纯态或是统计混合态. 如果式(5.3.7)中的态 $|\psi\rangle$ 是以叠加态式(5.3.1)表述的,就有

$$\boldsymbol{\rho} = \sum_{m,n} c_m c_n^* \ |k_m\rangle\langle k_n|, \tag{5.3.8}$$

这里密度矩阵有非对角元,因为式(5.3.1)代表了表示的变换. 式(5.3.7)的形式是对角矩阵,$w_\psi = 1$,而所有其他的系数都为零:$w_\varphi = 0$,此处 φ 是和 ψ 正交的态. 为了辨别一个密度矩阵是代表纯态还是代表统计混合态,必须先把矩阵对角化. 数一下有多少非零的矩阵元. 如果数目为 1,它代表纯态. 如果数目大于 1,它就代表混合态.

在 x 表示中,

$$\boldsymbol{\rho}(x'x) \equiv \langle x' | \boldsymbol{\rho} | x\rangle = \sum_k w_k \langle x' | k\rangle\langle k | x\rangle = \sum_k w_k \psi_k(x')\psi_k^*(x). \tag{5.3.9}$$

在以 $\boldsymbol{\rho}$ 代表的状态中任何可观测量 $\hat{A}$ 的期望值是

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}\rangle &= \sum_k w_k \langle k | \hat{A} | k\rangle = \int \mathrm{d}x\mathrm{d}x' w_k \langle k | x\rangle\langle x' | A | x\rangle\langle x' | k\rangle \\ &= \int \mathrm{d}x\mathrm{d}x' \langle x | \boldsymbol{\rho} | x'\rangle\langle x' | A | x\rangle = \int \mathrm{d}x\mathrm{d}x' \rho(x,x')A(x',x) = \mathrm{tr}\boldsymbol{\rho}A,\end{aligned} \tag{5.3.10}$$

在统计力学中,考虑体系处于温度 T 的环境中. 取本征态集 $|\varphi_i\rangle$,它们满足

$$\hat{H} | \varphi_i\rangle = E_i | \varphi_i\rangle, \tag{5.3.11}$$

则体系处于 $|\varphi_i\rangle$ 的几率是

$$w_i = \frac{1}{Q}\mathrm{e}^{-\beta E_i}, \tag{5.3.12}$$

此处

$$\beta = \frac{1}{kT}, \tag{5.3.13}$$

$$Q = \sum_i \mathrm{e}^{-\beta E_i}, \tag{5.3.14}$$

Q 是统计配分函数. 密度矩阵可以写作

$$\boldsymbol{\rho} = \frac{1}{Q}\sum_i \mathrm{e}^{-\beta E_i} \ |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| = \frac{1}{Q}\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}. \tag{5.3.15}$$

最后一步是将 $\mathrm{e}^{-\beta E_i}|\varphi_i\rangle$ 换成 $\mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}|\varphi_i\rangle$,再用完备条件 $\sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| = 1$ 得到的. 有时为了简便,用非归一的密度矩阵

$$\boldsymbol{\rho}(\beta) = \mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}, \tag{5.3.16}$$

这时在求期待值等问题中需要小心. $\boldsymbol{\rho}(\beta)$满足的方程是

$$-\frac{\partial \boldsymbol{\rho}}{\partial \beta}=\hat{H}\boldsymbol{\rho}, \tag{5.3.17}$$

$$\boldsymbol{\rho}(0)=1. \tag{5.3.18}$$

在 x 表示中

$$\boldsymbol{\rho}(x,x';\beta)=\langle x\mid \mathrm{e}^{-\beta\hat{H}}\mid x'\rangle, \tag{5.3.19}$$

$$-\frac{\partial}{\partial\beta}\boldsymbol{\rho}(x,x';\beta)=\hat{H}_x\boldsymbol{\rho}(x,x';\beta), \tag{5.3.20}$$

$$\boldsymbol{\rho}(x,x';0)=\delta(x-x'). \tag{5.3.21}$$

将式(5.3.19)与欧氏时空路径积分$\left\langle x\middle|\exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right)\middle|x'\right\rangle$比较,它们竟如此相似:只要设定

$$\tau=\hbar\beta=\frac{\hbar}{kT}, \tag{5.3.22}$$

统计力学中密度矩阵就可以用路径积分表示:

$$\boldsymbol{\rho}(x,x';\beta)=N\int[Dx(u)]\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_0^U\left\{\frac{1}{2}m\dot{x}^2(u)+V[x(u)]\right\}\mathrm{d}u\right], \tag{5.3.23}$$

此处 $U=\hbar\beta$. 体系所有的平衡态性质都能从密度矩阵得到.

为了印证一下用 Minkowski 时空计算的式(5.1.43),这里用欧氏时空计算谐振子的密度矩阵,利用一个路径积分的重要性质. 经典轨道的运动方程是

$$\ddot{X}-\omega^2X=0,\quad X(0)=x,\quad X(U)=x'. \tag{5.3.24}$$

解是

$$X=\frac{(x'-x\mathrm{e}^{-\omega U})\mathrm{e}^{\omega u}+(x\mathrm{e}^{\omega U}-x')\mathrm{e}^{-\omega u}}{2\sinh\omega U}. \tag{5.3.25}$$

经典作用可以直接计算:

$$S_0=\frac{m\omega}{2\sinh\omega U}[(x'^2+x^2)\cosh\omega U-2xx']. \tag{5.3.26}$$

将满足边界条件的任意轨道 x 用 X 表示:

$$x(u)=X(u)+y(u),\quad y(0)=y(U)=0. \tag{5.3.27}$$

二阶变分是

$$\delta^2S=\frac{m}{2}\int_0^U(\dot{y}^2+\omega^2y^2)\mathrm{d}u. \tag{5.3.28}$$

前置因子和路径积分分别是

$$F(U)\equiv\int[Dy]\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_0^U\left(\frac{m}{2}\dot{y}^2+\frac{m\omega^2}{2}y^2\right)\mathrm{d}u\right], \tag{5.3.29}$$

$$\rho(x,x';U)=\mathrm{e}^{-S_0/\hbar}F(U). \tag{5.3.30}$$

利用路径积分的基本性质

$$\boldsymbol{\rho}(x,x';U_1+U_2)=\int\rho(x,x'';U_2)\rho(x'',x;U_1)\mathrm{d}x'', \tag{5.3.31}$$

它的意义是把一个历史分两步走:有一个中间阶段 x'',两步分别用了虚时间 U_1 和 U_2. 对历史求和,中间值 x''是任意的,应该积分. 用式(5.3.31)便可以解出前置因子 $F(U)$. 将式(5.3.30)代入式(5.3.31):

$$F(U_1+U_2)\exp\left[-\frac{S_0(x,x';U_1+U_2)}{\hbar}\right]$$
$$=\int\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}[S_0(x,x'';U_2)+S_0(x'',x';U_1)]\right\}F(U_1)F(U_2)\mathrm{d}x''.$$

将式(5.3.26)代入，对 x'' 积分，得 $F(U)$ 满足的方程：

$$F(U_1+U_2)\left[\frac{2\,\hbar\pi\sinh\omega(U_1+U_2)}{m\omega}\right]^{\frac{1}{2}}$$
$$=F(U_1)\left[\frac{2\,\hbar\pi\sinh\omega U_1}{m\omega}\right]^{\frac{1}{2}}F(U_2)\left[\frac{2\,\hbar\pi\sinh\omega U_2}{m\omega}\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{5.3.32}$$

因此解是

$$\left[\frac{2\,\hbar\pi\sinh U}{m\omega}\right]^{\frac{1}{2}}F(U)=\mathrm{e}^{\alpha U},$$

或

$$F(U)=\left[\frac{m\omega}{2\,\hbar\pi\sinh U}\right]^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\alpha U}. \tag{5.3.33}$$

α 可以从归一化决定. 结果和式(5.1.43)相同. 这里用了式(5.3.31)而没有直接对式(5.3.29)求积分，是个巧妙的办法[3].

以下讨论耦合体系的密度矩阵给出了步骤以及最终结果. 在下面我们补充了中间计算①.

考虑一个与宏观量子隧穿有关的问题. 这是一个耦合的体系，一个体系质量为 M，坐标是 q，在势 $V(q)$ 中运动另一个是谐振子质量为 m，频率为 ω，坐标为 x，二者之间有耦合 $-\gamma xq$. Hamilton 量是

$$H=\frac{m\dot{x}^2}{2}+\frac{m\omega^2}{2}x^2+\frac{M\dot{q}^2}{2}+V(q)-\gamma xq. \tag{5.3.34}$$

密度矩阵为

$$\boldsymbol{\rho}(x,x';U)=N\int[Dq][Dx]\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_0^U\left(\frac{m\dot{x}^2}{2}+\frac{m\omega^2}{2}x^2-\gamma qx\right)\mathrm{d}u\right]$$
$$\times\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_0^U\left(\frac{M\dot{q}^2}{2}+V(q)\right)\mathrm{d}u\right], \tag{5.3.35}$$

边界条件为

$$x(0)=x,\quad x(U)=x'.$$

一般情况下路径积分不能积出. 但可以试图将 x 的泛函积分积出，得到体系 q 的有效作用量. 将符号稍作改变，对以下路径积分求值：

$$F[f;x,x']=\int[Dx]\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_0^U\left(\frac{m}{2}\dot{x}^2+\frac{m}{2}\omega^2x^2+\mathrm{i}f(u)x\right)\mathrm{d}u\right]$$
$$x(0)=x,\quad x(U)=x'. \tag{5.3.36}$$

从 x 的 Euler-Lagrange 方程看，

$$\ddot{X}-\omega^2X=\frac{\mathrm{i}}{m}f(u), \tag{5.3.37}$$

---

① 吕嵘同志参加了结果的推导，特此致谢.

这是受迫振子. 仍用 $x=X+y$, 作用量变为

$$S=\int_0^U\left[\frac{m}{2}(\dot{X}+\dot{y})^2+\frac{m\omega^2}{2}(X+y)^2+\mathrm{i}f(X+y)\right]\mathrm{d}u$$
$$=\int\frac{m}{2}\left[\dot{X}^2+\omega^2X^2+\frac{2}{m}\mathrm{i}fX\right]\mathrm{d}u+\int m\left[\dot{X}\,\dot{y}+\omega^2Xy+\frac{2}{m}\mathrm{i}fy\right]\mathrm{d}u$$
$$+\int\frac{m}{2}(\dot{y}^2+\omega^2y)\mathrm{d}u.$$

第二个积分的第一项可以变换为 $\int\dot{X}\,\dot{y}\mathrm{d}u=\dot{X}y\Big|_0^U-\int_0^U\ddot{X}y\mathrm{d}u$, 因此第二个积分变为 $\int m\left[-\ddot{X}+\omega^2X+\frac{\mathrm{i}}{m}f(u)\right]y\mathrm{d}u$, 它由于运动方程而等于 0. 第三个积分给出谐振子的前置因子: $\sqrt{m\omega/2\pi\hbar\sinh\omega U}$. 运动方程式(5.3.37)用参数变分法解, 即

$$X(u)=(c_1+y_1)\mathrm{e}^{\omega u}+(c_2+y_2)\mathrm{e}^{-\omega u},\tag{5.3.38}$$

此处

$$y_1=\frac{\mathrm{i}}{2m\omega}\int_0^u f(u)\mathrm{e}^{-\omega u}\mathrm{d}u,$$
$$y_2=-\frac{\mathrm{i}}{2m\omega}\int_0^u f(u)\mathrm{e}^{\omega u}\mathrm{d}u.\tag{5.3.39}$$

用 $X(0)=x, X(U)=x'$, 即可将 c_1, c_2 定出, 它们是 x, x', U 以及两个常数 A 和 B 的函数:

$$A=\frac{\mathrm{i}}{2m\omega}\int_0^U\mathrm{e}^{-\omega u}f(u)\mathrm{d}u,$$
$$B=\frac{\mathrm{i}}{2m\omega}\int_0^U\mathrm{e}^{\omega(U-u)}f(u)\mathrm{d}u.\tag{5.3.40}$$

经典作用量计算如下:

$$S_0=\frac{m}{2}\int_0^U\left(\dot{X}^2+\omega^2X^2+\frac{2}{m}\mathrm{i}f(u)X\right)\mathrm{d}u$$
$$=\frac{m}{2}\left[\dot{X}X\Big|_0^U+\int_0^U\left(-\ddot{X}+\omega^2X+\frac{2}{m}\mathrm{i}f\right)X\,\mathrm{d}u\right]$$
$$=\frac{m}{2}\left[\dot{X}X\Big|_0^U+\int_0^U\frac{\mathrm{i}}{m}f(u)X\mathrm{d}u\right].$$

将 X(式(5.3.38)和式(5.3.39))代入, 结果是

$$S_0=\frac{1}{4m\omega}\int_0^U\int_0^U\mathrm{e}^{-\omega|u-u'|}f(u)f(u')\mathrm{d}u\mathrm{d}u'$$
$$+\frac{m\omega}{2\sinh\omega U}[(x^2+x'^2)\cosh\omega U-2xx'+2A(x\mathrm{e}^{\omega U}-x')$$
$$+2B(x'\mathrm{e}^{\omega U}-x)+(A^2+B^2)\mathrm{e}^{\omega U}-2AB].\tag{5.3.41}$$

至此已将 F(见式(5.3.36))算出:

$$F[f,x,x']=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar\sinh\omega U}}\mathrm{e}^{-S_0/\hbar}.\tag{5.3.42}$$

在实际应用中需要计算以下 f 的泛函:

$$\mathscr{E}[f]\equiv\frac{\int F[f,x,x]\mathrm{d}x}{\int F(0,x,x)\mathrm{d}x}.\tag{5.3.43}$$

F 的前置因子不参与积分，在 $\mathscr{E}[f]$ 中约去. 分母积分为

$$\int \exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar\sinh\omega U}(\cosh\omega U-1)x^2\right]\mathrm{d}x=\left(\frac{\pi\hbar\sinh\omega U}{m\omega(\cosh\omega U-1)}\right)^{1/2}. \tag{5.3.44}$$

分子的 $F[f,x,x]$ 中的 $S_0|_{x'=x}$ 是

$$\begin{aligned}S_0|_{x'=x}=&\frac{1}{4m\omega}\int_0^U\int_0^U \mathrm{e}^{-\omega|u-u'|}f(u)f(u')\mathrm{d}u\mathrm{d}u'\\&+\frac{m\omega}{\sinh\omega U}\Big[x^2(\cosh\omega U-1)+(A+B)(\mathrm{e}^{\omega U}-1)x\\&+\left(\frac{A^2+B^2}{2}\right)\mathrm{e}^{\omega U}-AB\Big].\end{aligned} \tag{5.3.45}$$

第二项经过整理，变为

$$\frac{m\omega}{\sin\omega U}\left\{(\cosh\omega U-1)\left[x+\frac{1}{2}\,\frac{(A+B)(\mathrm{e}^{\omega U}-1)}{\cosh\omega U-1}\right]^2-AB(1+\mathrm{e}^{\omega U})\right\} \tag{5.3.46}$$

花括号中的第一项是与 x 有关的，进入式(5.3.43)分子的 $\int\exp[-S_0|_{x=x'}/\hbar]\mathrm{d}c$ 积分，结果是 $\left[\frac{\pi\hbar\sinh\omega U}{m\omega(\cosh\omega U-1)}\right]^{1/2}$ 正好和分母的积分式(5.3.44)约掉. 至此，对 $\mathscr{E}[f]$ 有贡献的只余下式(5.3.45)第一项和式(5.3.46)花括号中的第二项：

$$\begin{aligned}\mathscr{E}[f]=\exp\Big[&-\frac{1}{4m\omega\hbar}\int_0^U\int_0^U \mathrm{e}^{-\omega|u-u'|}f(u)f(u')\mathrm{d}u\mathrm{d}u'\\&+\frac{m\omega}{\hbar\sinh\omega U}(1+\mathrm{e}^{\omega U})AB\Big].\end{aligned} \tag{5.3.47}$$

将

$$AB=-\frac{1}{4m^2\omega^2}\int_0^U\int_0^U \mathrm{e}^{-\omega u}\mathrm{e}^{-\omega(u-u')}f(u)f(u')\mathrm{d}u\mathrm{d}u' \tag{5.3.48}$$

代入，再经过整理，最后可以得到

$$\mathscr{E}[f]=\exp\left[-\frac{1}{4m\omega\hbar}\int_0^U\int_0^U\frac{\cosh\left(\omega|u-u'|-\frac{\omega U}{2}\right)}{\sinh\frac{\omega U}{2}}f(u)f(u')\mathrm{d}u\mathrm{d}u'\right]. \tag{5.3.49}$$

5.4　衰变态的瞬子方法

考虑图5.6的势及力学模拟. 如果不考虑势垒隧穿，则在阱底可以有一个基态. 现在有了隧穿，能否和双阱问题一样用路径积分计算对能量的修正呢？从力学模拟看经典轨道是 $\tau=-\infty, X=0$ 到 $\tau=0$ 时，$X=\sigma$，此时速度降为0，开始走回头路，最后于 $\tau=+\infty$ 回到 $X=0$. 轨道示于图5.7. 这个解称为回弹(bounce)，见图5.6：指它到了 σ 就被弹回了. 如果计算 $\left\langle 0\left|\exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau_0\right)\right|0\right\rangle$，似乎和双阱类似，也能对一串回弹解求和，最后得到类似 $\left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\omega\tau_0/2}\times\exp(K\tau_0\mathrm{e}^{-S_0/\hbar})$ 的结果，当然 S_0,ω 和双阱情况不同.

实际情况并不如此简单. 首先，算出的修正比去掉的量还小，而这里又没有劈裂，算它有什么意义？其次，回弹解有一个极大值，即 $\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\tau}$ 在此为0：它有一个节点. 从束缚态能级的性

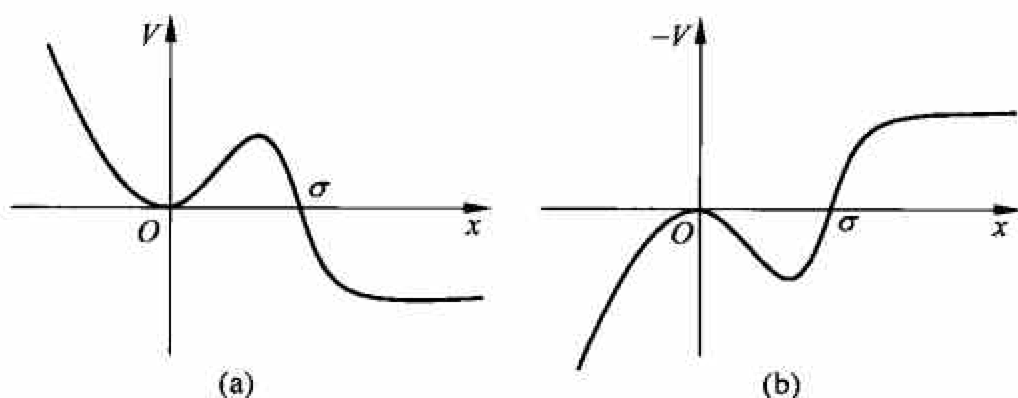


图 5.6 势(a)及力学模拟(b)

质看，零模解有节点，就应该还有一个能量更低(能量为负值)的无节点的解，与 $\prod_i \lambda_i^{-1/2}$ 成正比的因子 K 就会是虚数. 还有，从图 5.6(a)的势看，势垒穿透将使原居阱底的态成为不稳定的.

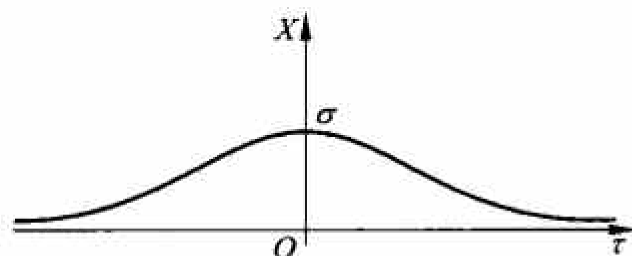


图 5.7 回弹解

确实，在阱中的态是不稳定的，这使它的能量有虚部，这个虚部决定态的衰变率. 态的不稳定是由势垒隧穿造成的，也应由路径积分算出. 对能量修正如果是实的，确定不好保留，因为弃去的部分还会比它大. 但虚部恰恰是需要保留的，因为它已是带头项(不考虑隧穿的原能量没有虚部)，而且它要给出态的衰变率. 结果的形式将会是

$$\mathrm{Im}E_0 = \frac{\Gamma}{2} = \hbar |K| \mathrm{e}^{-S_0/\hbar}, \tag{5.4.1}$$

Γ 是不稳定态的能级宽度. 在计算前置因子中，令 λ_{-1} 代表本征问题的负本征值，c_{-1} 代表 $x(\tau)$ 展开时负本征值态 u_{-1} 前的系数. 这样对 c_{-1} 的积分会是

$$\int \frac{\mathrm{d}c_{-1}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{1}{2\hbar} c_{-1}^2 \lambda_{-1}\right) = \int \frac{\mathrm{d}c_{-1}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{1}{2\hbar} |\lambda_{-1}| c_{-1}^2\right), \tag{5.4.2}$$

它是发散的. 另一方面从 $\prod_i \lambda_i^{-1/2}$ 看，有 $\frac{1}{\sqrt{\lambda_{-1}}} = \frac{i}{\sqrt{|\lambda_{-1}|}}$. 究竟实际情况如何呢? 可以试用解析延拓方法. 先设式(5.4.2)左方 λ_{-1} 为正值，积分后得 $\frac{1}{\sqrt{\lambda_{-1}}}$，然后将 λ_{-1} 延拓到负值，有 $\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{|\lambda_{-1}|}}$. 果真如此，则如果是 $\mathrm{Im}E_0 = \frac{\Gamma}{2} = \hbar|K|\mathrm{e}^{-S_0/\hbar}$，比正确值少一个因子 1/2. 这说明解析延拓要作得更细些[8]. 为了剖析一下解析延拓的作法，只在部分函数空间中考虑一族以实参数 z 表征的历史，有

$$J(z) = \int \frac{\mathrm{d}z}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{e}^{-S(z)/\hbar}, \tag{5.4.3}$$

这些轨道示于图 5.8. $z=1$ 相当于回弹轨道，它的作用量是极大值. z 更大的轨道由于粒子在大 x 值处(V 值为负)停留较长的(虚)时间，使作用量减小. 作用量与 z 的关系示于图 5.9. 由于随 z 增加 $S(z)$ 迅速变为更大的负值，导致积分(5.4.3)的发散. 由于这类计算是对定态(而非衰变态)进行的，因此直接搬到图 5.6(a)的势并不合适. 应该从图 5.10(a)的势开始将

它逐步扭曲趋向图 5.6(a),当作用量在 $z=1$ 处达到极大值之后,真实势(图 5.6(a))的作用量将偏离图 5.10(b)曲线在 $z>1$ 时向下弯,再继续原有的积分路径(沿 z 轴)就不行了.为了使积分有限并能给出虚部,应将积分路径从 $z=1$ 处扭曲到复平面,如图 5.11 所示.此处假定势的扭曲决定积分回路向上半平面扭曲.从鞍点 $z=1$ 向上方积分,用最大速率下降近似计算,有

$$J=\left[\int_{-\infty}^{1}+\int_{1}^{1+\mathrm{i}\infty}\right]\frac{\mathrm{d}z}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-S(z)/\hbar}.$$

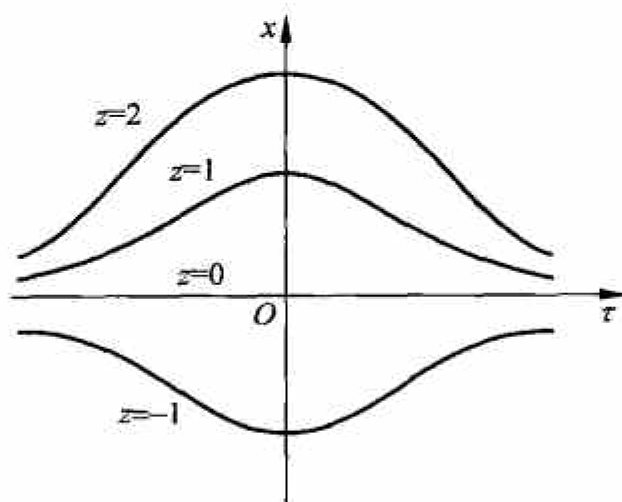


图 5.8 一族用参数 z 表征的轨道

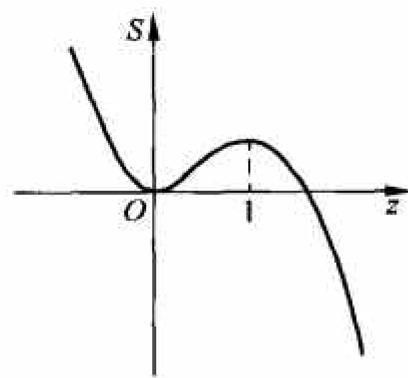


图 5.9 轨道的作用量

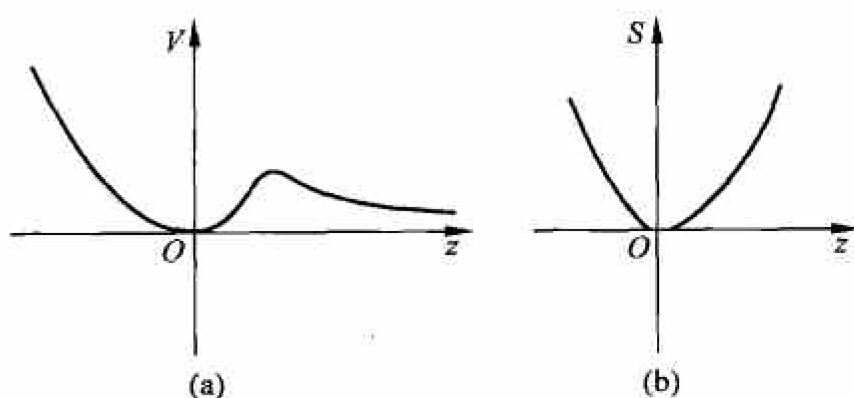


图 5.10 给出束缚态的势

(a) 势函数;(b) 不同轨道的作用量

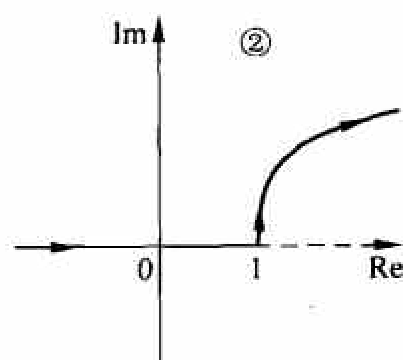


图 5.11 变化的积分回路

第一个积分给出实数.令 $z=1+\mathrm{i}y$,第二个积分是

$$J'=\mathrm{i}\int_{0}^{\infty}\mathrm{d}y\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\left[S(1)+\frac{1}{2}S''(1)(\mathrm{i}y)^{2}\right]\Big/\hbar\right),$$

此处 $S''(y)$ 在 $y=1$ 处是负值.因此 J 的虚部是

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}J&=\int_{0}^{\infty}\frac{\mathrm{d}y}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\left[S(1)-\frac{1}{2}S''(1)y^{2}\right]\Big/\hbar\right)\\&=\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-S(1)/\hbar}\mid S''(1)\mid^{-1/2}.\end{aligned}\qquad(5.4.4)$$

重要的 1/2 因子的来源是,此处 Gauss 积分是从 0 积到∞的,其值为自$-\infty$积到$+\infty$的积分值的 1/2.可以将以上模型式的讨论进行推广:

$$\mathrm{Im}K=\frac{1}{2}\left(\frac{S_0}{2\pi\hbar}\right)^{1/2}\left[\frac{\det'\left(-\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}+V''(X)\right)}{\det\left(-\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}+\omega^2\right)}\right],$$

$$\Gamma=2\hbar|K|\mathrm{e}^{-S_0/\hbar}=\hbar\left(\frac{S_0}{2\pi\hbar}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-S_0/\hbar}\left[\frac{\det'\left(-\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}+V''(X)\right)}{\det\left(-\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}+\omega^2\right)}\right]^{-1/2}. \quad (5.4.5)$$

Callan-Coleman 方法[8]的以上讨论不是严格证明，想法是从 J. S. Langer[9]处理相变问题的方法启发得来的.

作为一个例子，在附录 1 中讨论"二次加三次"势的隧穿问题①. 一方面可以印证本节讨论的与回弹解相应的本征问题具有负本征值而直接计算出能量虚部，另一方面在行列式比例计算上还有一些有用的方法. 结果将用于第 6 章.

实际上对一些具体问题可以直接计算二次变分的路径积分，而不涉及算符 $-\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}+V''(X)$ 的本征函数展开. 这一点将在附录 2 中讨论.

关于本节的内容，请参阅文献[6].

本章讨论的相干劈裂和衰变态瞬子方法，都属于路径积分的背景场计算方法. 它是一种近似方案，其特点是主要贡献来自经典轨道. 作用量的一阶变分 δS 为零给出经典轨道，即它给出作用量的极值. 二阶变分 $\delta^2 S$ 表示量子涨落的贡献. 为了保证远离经典轨道的贡献很小，必须把时间 t 变为 $\mathrm{i}\tau$，即从 Minkowski 空间转到欧氏空间. 这样轨道的权重因子将出现 e^{-S}，保证经典轨道（S 最小）对路径积分贡献最大，远离它的轨道的贡献指数衰减. 因此背景场方法只是一种半经典近似的方便框架，尤其是经典方程是非线性方程时，这种量子化是在它的经典解基础上进行的，即在经典弧子的基础上考虑量子涨落.

要强调的是路径积分方法本身是量子力学的一种表述，它并不包含任何近似，同时量子化方案绝不是唯一的. 从量子理论到其经典极限，可以用唯一的一种途径实现. 但给定经典理论，要从它出发去构造量子理论，本质上是要引入 Planck 常数的一种"变形"(deformation)②，途径并不唯一. 从经典 Poisson 括号到量子 Poisson 括号（对易子）是一种推广. 但这种办法对 Fermi 子并不适用：要改用反对易子. 判断量子化方案是否正确的原则是：量子理论应该包含经典极限，理论应有内在的自洽，当然更重要的是理论预言与实验结果符合. 正则量子化是我们熟悉的. 从正则量子化方案还演化出一种"对应原理量子化". 设波函数 ψ 为 Hamilton 量某一对称群的表示. 在对称变换下，ψ 的变化是 $\delta\psi$（c 数）. 令 $\hat{Q}$ 为与对称变换相对应的守恒量生成元，它通过二次量子化的算符 $\hat{\psi},\hat{\psi}^\dagger$ 表示，它们满足一定的对易关系. 对应原理量子化要求 $\delta\psi\propto[\hat{\psi},\hat{Q}]$③，通过这个要求可以得到生成元 $\hat{Q}$ 的形式. 通常在线性问题中，$\hat{\psi}$ 满足的正则对易关系给出熟知的 $\hat{Q}$ 生成元形式. 在非线性问题中，实际使用的对易关系不

① "二次加三次"势的隧穿结果首先由 A. O. Caldeira 给出(Ph. D. Thesis, Univ. of Sussex, 1980)，在文献[13]中引用了结果.

② 这是 L. Faddeev 的提法，他称从量子到经典的过程为"收缩"(contraction).

③ 左方 $\delta\psi$ 是 c 数，右方对易括号中的 $\hat{\psi}$ 是算符，故称"对应原理量子化".

一定是正则的. 这时原则上可以通过经典变分形式 $\delta\psi$ 找出相应的守恒量 $\hat{Q}$ 的形式. 路径积分原则上可以给出不做近似的量子力学计算,其谐振子精确解便是一例,当然结果和正则量子化完全一致. 路径积分形式通过 Faddeev-Popov 理论可以推广到普遍量子场论. 在非 Abel 规范场的量子化中,它提供很自然的理论框架,将幺正性与可重正化性统一到一个理论构架之中.

在路径积分的具体计算中都用了虚时间 $\tau=\mathrm{i}t$,这样才能在欧氏时空进行计算. 取虚时间的办法称为 Wick 转动,在物理学中是经常应用的. 对路径积分,一些数学家是有保留的,认为其 Wick 转动在数学上是不够严格的.

附录1　"二次加三次"势的隧穿

考虑"二次加三次"势(图 5.12(a))和它的力学模拟(5.12(b)). 势的形式是

$$\begin{aligned} V(q) &= \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 - \beta q^3 \\ &= \frac{27}{4}V_0\left[\left(\frac{q}{q_0}\right)^2 - \left(\frac{q}{q_0}\right)^3\right], \end{aligned} \tag{5. A1. 1}$$

此处

$$q_0 = \frac{m\omega^2}{2\beta},\quad V_0 = \frac{1}{54}\frac{(m\omega^2)^3}{\beta^2}.$$

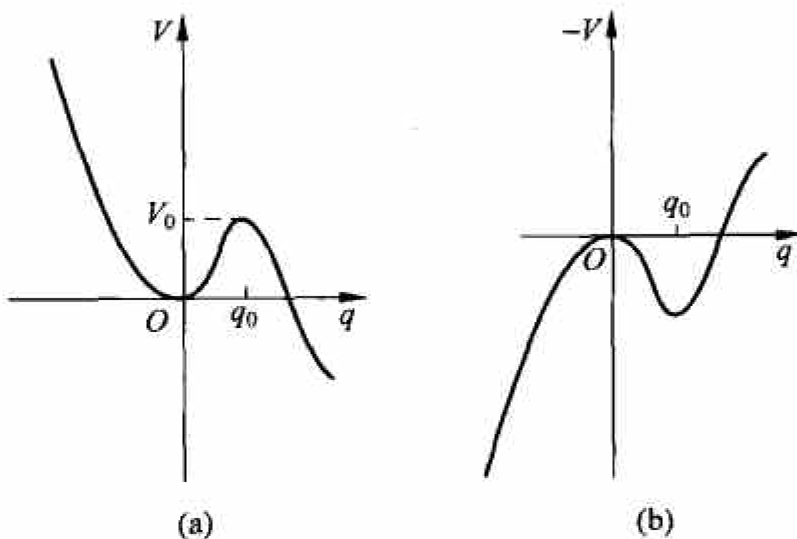


图 5.12　"二次加三次"势(a)及力学模拟(b)

计算隧穿率也是由计算经典作用、经典轨道、前置因子几个步骤组成[①]. 从力学模拟看出,经典轨道(回弹解)是 $q\left(-\frac{\tau_0}{2}\right)=0, q(0)=q_0, q\left(\frac{\tau_0}{2}\right)=0, \tau_0\to\infty$. 经典轨道是零能量解,因此,经典作用量是

$$S_0 = \int\left(\frac{1}{2}m\dot{q}^2 + V(q)\right)\mathrm{d}\tau = \int m\dot{q}^2\mathrm{d}\tau = \int m\dot{q}\,\mathrm{d}q = 2\int_0^{q_0}\sqrt{2mV(q)}\,\mathrm{d}q.$$

将式(5. A1. 1)代入,得

① 基于陈欣同志的推导,特此致谢.

$$S_0 = 2q_0\left(\frac{27}{2}mV_0\right)^{1/2}\int_0^{q_0}\left[\left(\frac{q}{q_0}\right)^2-\left(\frac{q}{q_0}\right)^3\right]^{1/2}\mathrm{d}\left(\frac{q}{q_0}\right)=\frac{36V_0}{5\omega}. \tag{5. A1. 2}$$

经典轨道满足的方程是

$$\frac{1}{2}m\dot{q}^2 = \frac{27}{4}V_0\left\{\left(\frac{q}{q_0}\right)^2-\left(\frac{q}{q_0}\right)^3\right\},$$

满足边界条件 $q(-\infty)=q(\infty)=0, q(0)=q_0$ 的解是

$$X(\tau) = q_0\,\mathrm{sech}^2\,\frac{1}{2q_0}\sqrt{\frac{27V_0}{2m}}\tau. \tag{5. A1. 3}$$

计算前置因子要先解一个本征问题,本征方程是(放进质量)

$$-m\frac{\mathrm{d}^2x_n}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(X)x_n=\lambda_n x_n, \tag{5. A1. 4}$$

其中 V''是势 V 的二次微商,

$$V''(q)=\frac{27V_0}{2q_0^2}\left(1-3\frac{q}{q_0}\right),$$

因此有

$$V''(X)=\frac{27V_0}{2q_0^2}\left[1-\frac{3}{\cosh^2\frac{1}{2q_0}\sqrt{\frac{27V_0}{2m}}\tau}\right]. \tag{5. A1. 5}$$

定义新参数

$$E_n=\frac{\lambda_n-\frac{27}{2}V_0\frac{1}{q_0^2}}{2m}\equiv\frac{\lambda_n-\omega^2}{2m},$$
$$V=\frac{81V_0}{4mq_0^2},\quad a=2q_0\sqrt{\frac{2m}{27V_0}}, \tag{5. A1. 6}$$

并加以整理,方程(5. A1. 4)变为①

$$\frac{\mathrm{d}^2x_n}{\mathrm{d}\tau^2}+2\left[E_n+\frac{V}{\cosh^2\frac{\tau}{a}}\right]x_n=0. \tag{5. A1. 7}$$

势能 $V(\tau)=\dfrac{V}{\cosh^2\frac{\tau}{a}}$ 示于图 5. 13. 方程正本征值是连续的,负本征值是分立的,它们是

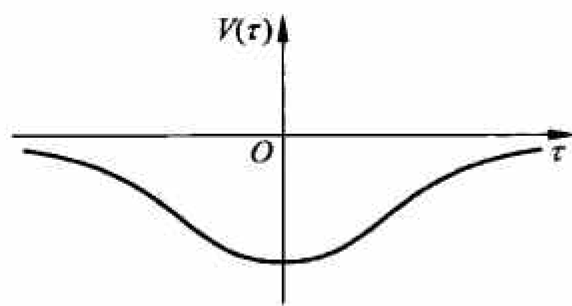


图 5. 13 本征方程的势

$$E_n=-\frac{1}{2a^2}\left[\frac{1}{2}\sqrt{8V_a^2+1}-\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^2$$
$$=-\frac{\omega^2}{8m}(3-n)^2,\quad n=0,1,2. \tag{5. A1. 8}$$

由式(5. A1. 6)转换为我们需要的 λ_n:

$$\lambda_n=\omega^2\left(1-\frac{1}{4}(3-n)^2\right). \tag{5. A1. 9}$$

三个分立的本征值是

① 可参阅文献[12]p. 73.

$$\lambda_0 = -\frac{5}{4}\omega^2, \quad \lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = \frac{3}{4}\omega^2. \tag{5. A1. 10}$$

对连续本征值,从式(5. A1. 6)定义

$$k = \sqrt{2mE} = \sqrt{\lambda_n - \omega^2}. \tag{5. A1. 11}$$

回顾一下与谐振子有关的本征问题

$$-m\frac{\mathrm{d}^2 x_n}{\mathrm{d}\tau^2} + \omega^2 x_n = \lambda_n x_n,$$

它的本征值 λ_n 是式(5. 1. 34)

$$\lambda_n = \omega^2 + \frac{n^2\pi^2}{\tau_0^2},$$

它是用方程的解加上边界条件 $x_n\left(\pm\frac{\tau_0}{2}\right)=0$ 求出的. 相应的 k 值是

$$k = \sqrt{\lambda_n - \omega^2} = \frac{n\pi}{\tau_0}, \tag{5. A1. 12}$$

因此当 τ_0 大但有限时,k 的谱是准连续的,其间距是 π/τ_0. 本征方程(5. A1. 7)也需加上边界条件 $x_n\left(\pm\frac{\tau_0}{2}\right)=0$,求出本征值谱. 定义

$$\xi = \tanh\frac{\omega\tau}{2}, \tag{5. A1. 13}$$

方程的解是超几何函数

$$x = (1-\xi^2)^{-\mathrm{i}\frac{k}{\omega}} F\left[-\mathrm{i}\frac{2k}{\omega} - 3, -\mathrm{i}\frac{2k}{\omega} + 4, -\mathrm{i}\frac{2k}{\omega} + 1, \frac{1}{2}(1-\xi)\right]. \tag{5. A1. 14}$$

ξ 是含 τ 的独立变量,k 与 λ_n 有关(见式(5. A1. 11)),将由边界条件确定,ω 定义包含于式(5. A1. 6):

$$\omega = \frac{27}{2}V_0\frac{1}{q_0^2}, \tag{5. A1. 15}$$

V_0 和 q_0 都是二次加三次的势参数. 方程本有两个线性独立的解,此处选了式(5. A1. 14),因为另一个解在原点是奇异的. 运用边界条件(τ_0 很大)只需知道解的渐近行为. 在 $\tau\to\pm\infty$,独立变量的极限如下:

$$\left.\begin{aligned}
&\text{当 } \tau\to\infty \text{ 时},\quad \tanh\frac{\omega\tau}{2}\to 1-2\mathrm{e}^{-\omega\tau},\quad \frac{1}{2}(1+\xi)\to 1,\quad \frac{1}{2}(1-\xi)\to \mathrm{e}^{-\omega\tau},\\
&\qquad (1-\xi^2)^{-\mathrm{i}\frac{k}{\omega}}\to \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\tau};\\
&\text{当 } \tau\to-\infty \text{ 时},\quad \tanh\frac{\omega\tau}{2}\to -1+2\mathrm{e}^{\omega\tau},\quad \frac{1}{2}(1-\xi)\to 1,\quad \frac{1}{2}(1+\xi)\to \mathrm{e}^{\omega\tau},\\
&\qquad (1-\xi^2)^{-\mathrm{i}\frac{k}{\omega}}\to \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\tau}.
\end{aligned}\right\} \tag{5. A1. 16}$$

解(5. A1. 14)的渐近行为如下:

$$\left.\begin{aligned}
&\tau\to+\infty \text{ 时},\quad x\to \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\tau}F(\quad,\quad,\quad,0) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\tau},\\
&\tau\to-\infty \text{ 时},\quad x\to \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\tau}F(\quad,\quad,\quad,1).
\end{aligned}\right\} \tag{5. A1. 17}$$

运用公式[①]

① 见文献[12],附录 e, p. 659.

$$F\left(\alpha,\beta,\gamma,\frac{1}{2}(1-\xi)\right)=\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma-\alpha-\beta)}{\Gamma(\gamma-\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)}F\left(\alpha,\beta,\alpha+\beta+1-\gamma;\ \frac{1}{2}(1+\xi)\right)$$
$$+\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha+\beta-\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}\left(\frac{1}{2}(1+\xi)\right)^{\gamma-\alpha-\beta}$$
$$\times F\left(\gamma-\alpha,\gamma-\beta,\gamma+1-\alpha-\beta,\frac{1}{2}(1+\xi)\right),\tag{5. A1. 18}$$

可以将 $\tau\to-\infty$ 和 $\tau\to+\infty$ 的解联系起来. 解(5. A1. 14)的 $\gamma-\beta=-3$，而 $\Gamma(-3)=\infty$，故式(5. A1. 18)第一项为 0. 在 $\tau\to-\infty$ 时

$$F\left(-\mathrm{i}\frac{2k}{\omega}-3,-\mathrm{i}\frac{2k}{\omega}+4,-\mathrm{i}\frac{2k}{\omega}+1,1\right)$$
$$=-\frac{\left(1+\mathrm{i}\frac{2k}{\omega}\right)\left(1+\mathrm{i}\frac{k}{\omega}\right)\left(1+\mathrm{i}\frac{2k}{3\omega}\right)}{\left(1-\mathrm{i}\frac{2k}{\omega}\right)\left(1-\mathrm{i}\frac{k}{\omega}\right)\left(1-\mathrm{i}\frac{2k}{3\omega}\right)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}2k\tau},\tag{5. A1. 19}$$

即 $\tau\to-\infty$ 时

$$x=-\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\tau}\frac{\left(1+\mathrm{i}\frac{2k}{\omega}\right)\left(1+\mathrm{i}\frac{k}{\omega}\right)\left(1+\mathrm{i}\frac{2k}{3\omega}\right)}{\left(1-\mathrm{i}\frac{2k}{\omega}\right)\left(1-\mathrm{i}\frac{k}{\omega}\right)\left(1-\mathrm{i}\frac{2k}{3\omega}\right)}.\tag{5. A1. 20}$$

式(5. A1. 17)第一式给出 $\tau\to+\infty$ 时，$x=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\tau}$. 因此在 $\tau\to-\infty$ 时，x 应是 $x=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\tau}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_k}$，$\delta_k$ 是散射相移. 故式(5. A1. 20)给出

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_k}=-\frac{\left(1+\mathrm{i}\frac{2k}{\omega}\right)\left(1+\mathrm{i}\frac{k}{\omega}\right)\left(1+\mathrm{i}\frac{2k}{3\omega}\right)}{\left(1-\mathrm{i}\frac{2k}{\omega}\right)\left(1-\mathrm{i}\frac{k}{\omega}\right)\left(1-\mathrm{i}\frac{2k}{3\omega}\right)}.\tag{5. A1. 21}$$

方程对 $\tau\to-\tau$ 是对称的，对向 $-\tau$ 方向传播结果是一样的. 综合上述结果，方程连续态有两个线性独立的解：

$$x_k(\tau)\to\begin{cases}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\tau}, & \tau\to+\infty;\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\tau+\mathrm{i}\delta_k}, & \tau\to-\infty;\end{cases}\tag{5. A1. 22}$$

$$x_k(\tau)\to\begin{cases}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\tau}, & \tau\to+\infty;\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\tau+\mathrm{i}\delta_k}, & \tau\to-\infty.\end{cases}\tag{5. A1. 23}$$

通解为

$$x_k=Ax_k(\tau)+Bx_k(-\tau).\tag{5. A1. 24}$$

边界条件 $x\left(\pm\frac{\tau_0}{2}\right)=0$ 给出

$$\begin{aligned}Ax_k\left(\frac{\tau_0}{2}\right)+Bx_k\left(-\frac{\tau_0}{2}\right)&=0,\\ Ax_k\left(-\frac{\tau_0}{2}\right)+Bx_k\left(\frac{\tau_0}{2}\right)&=0.\end{aligned}\tag{5. A1. 25}$$

A 和 B 存在非零解的条件是

$$\frac{x_k(\tau_0/2)}{x_k(-\tau_0/2)}=\pm 1.\tag{5. A1. 26}$$

对足够大的 τ_0,式(5. A1. 26)、式(5. A1. 22)、式(5. A1. 23)给出

$$\exp\left(\mathrm{i}k\frac{\tau_0}{2}\right)=\pm\exp\left(-\mathrm{i}k\frac{\tau_0}{2}+\mathrm{i}\delta_k\right),$$

即

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\tau_0-\mathrm{i}\delta_k}=\pm 1,$$

亦即

$$k\tau_0-\delta_k=n\pi,\quad n=0,1,2,\cdots. \tag{5. A1. 27}$$

第 n 个本征值 $\tilde{k}_n$ 是[①]

$$\tilde{k}_n=\frac{n\pi+\delta_k}{\tau_0}. \tag{5. A1. 28}$$

相应的 λ_n 是

$$\lambda_n=\tilde{k}_n^2+\omega^2. \tag{5. A1. 29}$$

下面先计算分立本征值的 $\dfrac{\det'(-\partial_\tau^2+V'')}{\det(-\partial_\tau^2+\omega^2)}$,它是

$$\frac{-\frac{5}{4}\omega^2\cdot\frac{3}{4}\omega^2}{\omega^2\cdot\omega^2\cdot\omega^2}=-\frac{15}{16\omega^2}, \tag{5. A1. 30}$$

分子上由于是 det′已将零本征值去掉. 对准连续谱,有

$$\prod_{n=1}^{\infty}\frac{\omega^2+\tilde{k}_n^2}{\omega^2+k_n^2}=\exp\left[\sum_n\ln\left(1+\frac{\tilde{k}_n^2-k_n^2}{\omega^2+k_n^2}\right)\right]. \tag{5. A1. 31}$$

指数上求和计算如下:对 τ_0 足够大,有 $\tilde{k}_n^2-k_n^2\approx 2k_n(\tilde{k}_n-k_n)$,另有 $\tilde{k}_n-k_n=\dfrac{\delta_k}{\tau_0}$. 因而有

$$\ln\left(1+\frac{\tilde{k}_n^2-k_n^2}{\omega^2+k_n^2}\right)\approx\frac{2k_n\delta_k}{\tau_0(\omega^2+k_n^2)}.$$

于是得

$$\begin{aligned}\sum_n\ln\left(1+\frac{\tilde{k}_n^2-k_n^2}{\omega^2+k_n^2}\right)&\approx\frac{\tau_0}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}k\,\frac{2k\delta_k}{\tau_0(\omega^2+k_n^2)}\\&=\frac{1}{\pi}\int_{k=0}^{k=\infty}\delta_k\,\mathrm{d}\ln(\omega^2+k^2).\end{aligned} \tag{5. A1. 32}$$

式(5. A1. 32)与 τ_0 无关,经过分部积分和利用式(5. A1. 21),得到上式等于 $\ln\dfrac{4}{225}$. 因此式(5. A1. 31)是 $\dfrac{4}{225}$. 再包括进(5. A1. 30)的贡献,$\dfrac{\det'}{\det}$ 的值是 $-\dfrac{15}{16\omega^2}\dfrac{4}{225}=-\dfrac{1}{60\omega^2}$. 因此有

$$\left[\frac{\det'(-\partial_\tau^2+V''(X))}{\det(-\partial_\tau^2+\omega^2)}\right]^{-\frac{1}{2}}=\mathrm{i}\sqrt{60}\,\omega,$$

而宽度 Γ 由式(5. 4. 5)给出:

$$\Gamma=\sqrt{60}\,\omega\left(\frac{S_0}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-S_0/\hbar}=\sqrt{60}\,\omega\left(\frac{18V_0}{5\pi\hbar\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-36V_0/5\hbar\omega}. \tag{5. A1. 33}$$

---

① 记为 $\tilde{k}$ 以区别于谐振子的有关本征值.

附录 2　计算路径积分二次变分的平移法

这个计算不经过对 $\hat{M}\equiv -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}+V''$ 本征函数展开，而采用一个映射. 方法是 R. Dashan, B. Hasslacher, A. Neveu[13] 首先在场论中计算能谱时使用的，他们用的是实时间. 梁九卿和 H. J. W. Müller-Kirsten[11] 将此法用于量子隧穿问题，用虚时间，称为"平移法(shifting method)"，以下作一简单介绍. 路径在经典解 x_c 附近展开，$x=x_c+y$，二阶变分对路径积分的贡献是

$$I=\int[Dy]\mathrm{e}^{-\delta^2 S_E}=\int[Dy]\exp\left(-\int_{-T}^{T}y\,\hat{M}y\,\mathrm{d}\tau\right),\tag{5. A2. 1}$$

此处

$$\hat{M}=-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+V''(x_c).\tag{5. A2. 2}$$

y 满足边界条件

$$y(\pm T)=0.$$

引入映身 $y\to z$：

$$z(\tau)=y(\tau)-\int_{-T}^{T}\frac{\dot{N}(\tau')}{N(\tau')}y(\tau')\mathrm{d}\tau',\tag{5. A2. 3}$$

此处 $N(\tau)$满足方程

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}-2V''(x_c)\right]N(\tau)=0,\tag{5. A2. 4}$$

即 $N(\tau)$就是$\hat{M}$的零模解，$N(\tau)=\frac{\mathrm{d}x_c}{\mathrm{d}\tau}$. 式(5. A2. 3)决定 $z(\tau)$满足的边界条件 $z(-T)=0$，而 $z(T)$要由式(5. A2. 3)的逆映射给出. 从式(5. A2. 3)以及 $y(-T)=0$，$z(-T)=0$ 可以得出式(5. A2. 3)的逆映射[13]

$$y(\tau)=z(\tau)+N(\tau)\int_{-T}^{\tau}\frac{\dot{N}(\tau')}{N^2(\tau')}z(\tau')\mathrm{d}\tau'.\tag{5. A2. 5}$$

式(5. A2. 5)给出

$$z(T)+N(T)\int_{-T}^{T}\frac{\dot{N}(\tau')}{N^2(\tau')}z(\tau')\mathrm{d}\tau'=0.\tag{5. A2. 6}$$

这是 $z(\tau)$满足的第二个边界条件. 映射(5. A2. 3)带来的简化是，$\delta^2 S_E$ 变为①

$$\delta^2 S_E=\frac{1}{2}\int_{-T}^{T}\dot{z}^2(\tau)\mathrm{d}\tau.\tag{5. A2. 7}$$

作为代价，它导致 $z(T)$受到约束(见式(5. A2. 6)). 约束可以用 Lagrange 不定乘子解决. 将 $N(\tau)$改写为$\dot{x}_c(\tau)$，积分 I(式(5. A2. 1))即可写为

$$I=\int[Dz]\mathrm{d}\alpha\left|\frac{\partial y}{\partial z}\right|\exp\left[-\int_{-T}^{T}\mathrm{d}\tau\left\{\frac{1}{2}\dot{z}^2+\alpha\left(z(T)+\dot{x}_c(T)\int_{-T}^{T}\frac{\ddot{x}_c(\tau')}{\dot{x}_c^2(\tau')}z(\tau')\mathrm{d}\tau'\right)\right\}\right],\tag{5. A2. 8}$$

---

① 见文献[15]附录 B.

此处$\left|\dfrac{\partial y}{\partial z}\right|$是映射的Jacobian行列式，指数上包含Lagrange不定乘子α的一项反映了$z(T)$受到的约束．经过繁复的积分，可将I直接算出①，最后结果是

$$I=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}[\dot{x}_c(-T)\,\dot{x}_c(T)]^{-1/2}\left[\int_{-T}^{T}\frac{d\tau}{\dot{x}_c^2(T)}\right]^{-1/2}. \tag{5.A2.9}$$

这个结果给出一个重要结论：对扭折解，$\dot{x}_c(-T)=\dot{x}(T)$，因此第一个括号内因子为正，对回弹解，$\dot{x}_c(-T)=-\dot{x}_c(T)$，这个因子为负，$I$为虚数．文献[14]给出倒双阱势$I$的数值．

附录3　谐振子前置因子的另一种算法

以下介绍文献[7]的算法．1+1维欧氏时空谐振子的Lagrange量是

$$L=\frac{1}{2}\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2+\frac{1}{2}\omega^2x^2. \tag{5.A3.1}$$

势能部分

$$V''=\omega^2 \tag{5.A3.2}$$

为常数．经典轨道方程是

$$-\frac{d^2X}{d\tau^2}+\omega^2X=0.$$

为了演示方法，先计算一个简单情况：对于任何τ值，$X(\tau)=0$．经典谐振子在原点静止．经典作用量是

$$S_0=0.$$

为了计算前置因子，考虑x_n满足的方程

$$\left(-\frac{d^2}{d\tau^2}+\omega^2\right)x_n=\lambda_nx_n. \tag{5.A3.3}$$

边界条件是

$$x_n(-\tau_0/2)=0,x_n(\tau_0/2)=0.$$

边界条件给出方程的本征值②：

$$\lambda_n=\omega^2+\frac{n^2\pi^2}{\tau_0^2}=\frac{n^2\pi^2}{\tau_0^2}\left(1+\frac{\omega^2\tau_0^2}{n^2\pi^2}\right),n=1,2,\cdots \tag{5.A3.4}$$

以及

$$\prod_n\lambda_n^{-1/2}=\left(\prod_n\frac{n^2\pi^2}{\tau_0^2}\right)^{-1/2}\left[\prod_n\left(1+\frac{\omega^2\tau_0^2}{n^2\pi^2}\right)\right]^{-1/2}.$$

上式右方的两个因子可以分别计算．先考虑自由粒子，（即弹性常数为零的谐振子，$\omega=0$．）

---

① 见文献[15]附录B.

② 方程(5.A3.3)的解以及相应的本征值是：

$$x_n(\tau)=\cos\sqrt{\lambda_n-\omega^2}\,\tau,\quad(\lambda_n-\omega^2)^{1/2}=(2n+1)\pi/\tau_0,n=0,1,2,3\cdots$$

$$x_n(\tau)=\sin\sqrt{\lambda_n-\omega^2}\,\tau,(\lambda_n-\omega^2)^{1/2}=2n\pi/\tau_0,n=1,2,3\cdots$$

本征值谱因而是

$$\lambda_n=\omega^2+\frac{n^2\pi^2}{\tau_0^2},\quad n=1,2,3\cdots$$

它的本征值是 $\lambda_n=\frac{n^2\pi^2}{\tau_0^2}$，因此，

$$\left\langle 0\left|\exp\left(-\frac{p^2}{2\hbar}\tau_0\right)\right|0\right\rangle = N\left(\prod_n \frac{n^2\pi^2}{\tau_0^2}\right)^{-1/2}.$$

上式的左方可以直接计算. 用式(5.1.11)，并考虑到自由粒子的零点波函数是 $\psi_n(0)=1$，可得

$$\left\langle 0\left|\exp\left(-\frac{p^2}{2\hbar}\tau_0\right)\right|0\right\rangle = \sum_n \exp\left(-\frac{p_n^2}{2\hbar}\tau_0\right)\psi_n(0)\psi_n^*(0) = \sum_n \exp\left(-\frac{p_n^2}{2\hbar}\tau_0\right)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{2\pi}\mathrm{e}^{p^2\tau_0/2\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tau_0/\hbar}}.$$

因此有

$$N\left(\prod_n \frac{n^2\pi^2}{\tau_0^2}\right)^{-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tau_0/\hbar}}.$$

连乘式的第二个因子可以用公式①

$$\pi y\prod_n\left(1+\frac{y^2}{n^2}\right) = \sinh\pi y$$

给出. 总起来，

$$\left\langle 0\left|\mathrm{e}^{-\hat{H}\tau_0/\hbar}\right|0\right\rangle = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}(2\sinh\omega\tau_0)^{-1/2}. \tag{5.A3.5}$$

取大的 τ_0 值时，考虑到

$$(2\sinh\omega\tau_0)^{-1/2} = \mathrm{e}^{\omega\tau_0/2}(1-\mathrm{e}^{-2\omega\tau_0})^{1/2} \approx \mathrm{e}^{-\omega\tau_0/2}\left(1+\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-2\omega\tau_0}+\cdots\right),$$

就有

$$\lim\sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{\hbar}\tau_0\right)|\langle 0\mid n\rangle|^2 = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\omega\tau_0/2}\left(1+\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-2\omega\tau_0}+\cdots\right) \tag{5.A3.6}$$

比较式(5.A3.6)和式(5.1.11)二式的右方，就得到最低的两个偶数态($n=0,2$)的本征值和零点波函数：

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2},\psi_0^2(0) = \left(\frac{\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2}. \tag{5.A3.7}$$

$$E_0 = \frac{5\,\hbar\omega_0}{2},\psi_2^2(0) = \frac{1}{2}\left(\frac{\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2}. \tag{5.A3.8}$$

由于我们计算的是特殊情况 $x_i=x_f=0$，奇宇称态不会出现.

参考文献

[1] Feynman R P. Rev Mod Phys, 1948, 20: 367.
[2] Feynman R P, Hibbs A R. Quantum Mechanics and Path Integrals. New York: McGraw Hill, 1965.
[3] Feynman R P. Statistical Mechanics. Reading, W. A. Benjamin, 1972.

① 见 I. S. Gradshtein, I. M. Ryzhik. Tables of Integrals, Series and Products. Academic, 1968. 这个等式可以从一个有趣的角度理解. 左方可以看成是无限大阶的多项式，零点在 $\pm in/\pi$, $n=0,1,2\cdots$ 右方零点也在这些点上. 双方在有限复平面上都是解析函数，因此彼此相等.

[4] Swanson M S. Path Integrals and Quant um Processes. Boston: Academic, 1992.
[5] Kleinert H. Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Science. Singapore: World Scientific, 1990.
[6] Coleman S. In: The Use of Instantons, in the Whys of Subnuclear Physics. Zichichi A, ed. New York: Plenum Press, 1977.
[7] Vainstein A I, Zakharov V I, Novikov V A, Shifman M A. Sov Phys Uspekhi, 1982, 25: 195.
[8] Callen C, Coleman S. Phys Rev, 1977, D 16: 1762.
[9] Langer J S. Ann Phys(N. Y.), 1967, 108: 41.
[10] Faddeev L D, Popov V N. Phys Lett, 1967, 25B: 29.
[11] Caldeira A O, Leggett A J. Ann Phys(N. Y.), 1983, 149: 374.
[12] Landau L D, Lifshitz E M. Quantum Mechanics. 3-rd edieion. Oxford: Pergamon press, 1977.
[13] Dashan R F, Hasslacher B, Neveu A. Phys Rev, 1974, D 16: 1762.
[14] Liang J Q, Müller-Kirsten H J W. Phys Rev, 1992, D 46: 4685.
[15] Liang J Q, Müller-Kirsten H J W. Phys Rev, 1994, D 50: 6519.

第6章
宏观水平上的量子力学

在第 4 章中集中讨论了量子力学与经典力学的关系，核心问题是量子力学作为普遍规律应描述宏观体系．在宏观体系中观察不到的量子力学线性叠加原理，就应从量子力学原理出发找到使它消失的机构，这就是与环境相互作用造成的失谐．但也有些特殊情况使得相位相干仍能在宏观体系中保留下来，这就是实验室中的 Schrödinger 猫．在第 4 章 4.9 节中我们曾讨论了这个问题．

在量子力学中，多粒子体系是用波函数 $\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_n)$ 描述的．但也有极特殊的情况，宏观数量的粒子被波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 描述，这里只有一个坐标．不仅粒子数是宏观量，而且 $\boldsymbol{r}$ 所及的范围也可以是宏观尺度的．这些粒子处于高度相干的状态，因此表现出极为特殊的性质．如超导中的 Cooper 对以及超流体，对前者电阻为 0 以及排斥磁通的 Meissner 效应，对后者黏滞性为 0 的超流性，以及无穷大的热传导等都属于“超越”(super)的性质．这些表现出来的都还是宏观性质．另外纯属量子力学的性质，诸如势垒隧穿以及相位相干也能在宏观体系中存在．在超导 Josephson 结中能出现宏观量子隧穿现象．宏观体系呈现出量子力学性质，必须克服环境的影响，因为它能够破坏相位相干性．超导与超流现象都和一个量子统计现象，即 Bose-Einstein 凝聚有关．在第 10 章将讨论这个问题．另一个例子是磁的宏观量子现象，如单畴铁磁和反铁磁粒子的大自旋能隧穿磁各向异性造成的势垒以及有可能实现在此基础上发生的宏观量子相干(线性叠加原理)．这些现象不仅涉及量子力学的基础，而且对信息存储等问题也有密切关系．

耗散系统的量子力学近年来获得了许多进展，其中一个重要的方法(Feynman 和 Vernon，Leggett)是：将环境用大量谐振子集团代表，谐振子和体系有相互作用；写出体系-环境的路径积分，对环境坐标进行积分，就能得到系统在环境作用下的包含耗散效应的有效理论(6.5 节)．

6.1 具有宏观意义的波函数

在量子力学中，多粒子体系的波函数与这些粒子的坐标有关，以 $\psi(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N;\ t)$表示．处理问题的复杂性随 N 的增大而增加．在量子力学发展的早期，它被认为是只描述微观体系的．自从超流现象发现以来，F. London 最先指出现象的根源是宏观量的原子聚集在体系

的基态上，形成 Bose-Einstein 凝聚体. N. Bogoliubov 在 1947 年"弱相互作用 Bose 气体"理论中首先引入了凝聚体波函数的概念①：

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \sqrt{\rho(\boldsymbol{r},t)}\,e^{i\theta(\boldsymbol{r},t)}, \tag{6.1.1}$$

此处 ρ 是单位体积中凝聚体粒子数，波函数写作振幅与相因子乘积，θ 是相位. ρ 是宏观量，$|\psi|^2=\rho$ 已经具有宏观意义. 从波函数算出的流密度是

$$\boldsymbol{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\,\nabla\psi^* - \psi^*\,\nabla\psi) = \frac{\hbar}{m}\rho\,\nabla\theta, \tag{6.1.2}$$

ρ 和 $\boldsymbol{j}$ 都是实验可以测量的宏观物理量. 相角的梯度是可以测量的：将 $\boldsymbol{j}$ 写成

$$\boldsymbol{j} = \rho\boldsymbol{v}_s, \tag{6.1.3}$$

$\boldsymbol{v}_s$ 是超流体速度，

$$\boldsymbol{v}_s = \frac{\hbar}{m}\nabla\theta. \tag{6.1.4}$$

在式(6.1.1)中 $\boldsymbol{r}$ 不是任何一个原子的坐标，ψ 所描述的是整个凝聚体的性质. 凝聚体是宏观量原子高度相干的集合.

1950 年，V. L. Ginzburg 和 L. D. Landau 提出了超导的唯象理论. 首先应说明的是，当时超导的微观机制尚未被发现②. Ginzburg-Landau 理论基于 Landau 在 1937 年提出的第二类相变理论. 以铁磁的相变为例，设有立方晶格，格点 $\{i\}$ 处有自旋 $\boldsymbol{S}_i$. 体系的 Hamilton 量是③

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j, \tag{6.1.5}$$

此处 J 是交换能，$\langle i,j\rangle$ 表示求和只对最近邻间进行. 体系的磁化算符定义为④

$$\boldsymbol{M} = \frac{1}{V}\sum_i\boldsymbol{S}_i. \tag{6.1.6}$$

在量级为 $O\left(\frac{J}{k}\right)$ 的温度 T_c 处会发生相变，在 $T<T_c$ 时可以出现自发磁化 $\langle\boldsymbol{M}\rangle\neq0$，而 $T>T_c$ 时热涨落使体系无规化，$\langle\boldsymbol{M}\rangle=0$. $\langle\boldsymbol{M}\rangle$ 即是序参量. 为了说明相变，Landau 写出体系自由能密度

$$f(\langle\boldsymbol{M}\rangle,T) = f(0,T) + \alpha(T)\langle\boldsymbol{M}\rangle^2 + \frac{\beta(T)}{2}\langle\boldsymbol{M}\rangle^4. \tag{6.1.7}$$

在临界温度 T_c 附近，α 和 β 的行为是

$$\begin{aligned}\alpha(T) &= \alpha_0\left(\frac{T}{T_c}-1\right),\\ \beta(T) &= \beta_0.\end{aligned} \tag{6.1.8}$$

在 T_c 以上，α 和 β 都为正. 因此自由能在 $\langle\boldsymbol{M}\rangle=0$ 处为极小，这是顺磁相(没有自发磁化). 当

---

① 见本书第 10 章 10.4 节. 此处 ψ 是单粒子波函数，要注意与多粒子波函数 $\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N;t)$ 的区别. 在以下讨论中 ψ 常常与时间无关.

② Cooper 对是在 1956 年提出的.

③ 参阅第 7 章 7.1 节.

④ 略去单位自旋的磁矩常数，V 为体积.

$T<T_c$ 时，$\beta>0$，$\alpha<0$. 此时自由能与$\langle \boldsymbol{M}\rangle$有关的二项之和就出现如图 6.1 所示的行为. 自由能的极小值出现在$|\langle \boldsymbol{M}\rangle|=\sqrt{-\alpha(T)/\beta(T)}$处，从而出现了自发磁化

$$|\langle \boldsymbol{M}\rangle|=\sqrt{\frac{\alpha_0}{\beta_0}\left(1-\frac{T}{T_c}\right)}. \tag{6.1.9}$$

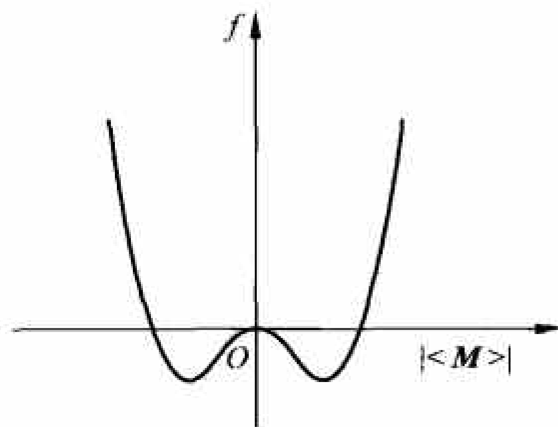


图 6.1　$T<T_c$ 时自由能与$\langle \boldsymbol{M}\rangle$的关系

在求自由能极小的过程中，仅能确定$\langle \boldsymbol{M}\rangle$的大小，而不能确定其方向. 这个简并的来源是 Hamilton 量式(6.1.5)的旋转不变性. 但一旦体系的平衡状态取了一定的自发磁化方向，它却不再尊重旋转对称性. 这种体系 Hamilton 量的对称性被其基态所破缺的情况，称为对称的自发破缺.

将以上的理论用于超导相变. 记超导的序参量为 ψ，Ginzburg-Landau 的自由能写作

$$F=F_n+\int\left\{\frac{\hbar^2}{2m^*}|\nabla\psi|^2+a|\psi|^2+\frac{1}{2}b|\psi|^4\right\}\mathrm{d}^3x, \tag{6.1.10}$$

此处 F_n 是正常态(即 $\psi=0$ 态)的自由能. 和以上的讨论相仿，$b>0$，而 a 则写作

$$a=\alpha(T-T_c),\quad \alpha>0. \tag{6.1.11}$$

式(6.1.10)括号中第一项考虑到序参量随坐标的变化，而其梯度会给出相应的“动能”，m^* 是有效质量参数. 超导要考虑外加磁场. 有了磁场 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 后，自由能应有两个变化，其一是增加磁场能量密度 $\boldsymbol{B}^2/8\pi$，其二是理论的规范不变性要求以下置换：

$$\nabla\to\nabla-\frac{\mathrm{i}e^*}{\hbar c}\boldsymbol{A}, \tag{6.1.12}$$

此处 e^* 是有效电荷参数. 因此有

$$F=F_{n0}+\int\left\{\frac{\boldsymbol{B}^2}{8\pi}+\frac{\hbar^2}{2m^*}\left|\left(\nabla-\frac{\mathrm{i}e^*}{\hbar c}\boldsymbol{A}\right)\psi\right|^2+a|\psi|^2+\frac{1}{2}b|\psi|^4\right\}\mathrm{d}^3x, \tag{6.1.13}$$

F_{n0} 是正常态无磁场情况下的自由能. 由于 ψ 是复函数，在求 F 极小(即 $\delta F=0$)时应对 ψ,ψ^* 独立变分. 对 ψ 及对 ψ^* 变分结果相同：

$$\frac{1}{2m^*}\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{e^*}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi+a\psi+b|\psi|^2\psi=0, \tag{6.1.14}$$

对 $\boldsymbol{A}$ 变分时，得

$$\nabla\times\boldsymbol{B}=\frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}, \tag{6.1.15}$$

此处

$$\boldsymbol{j}=-\frac{\mathrm{i}e^*\hbar}{2m^*}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)-\frac{e^{*2}}{m^*c}|\psi|^2\boldsymbol{A}. \tag{6.1.16}$$

从式(6.1.15)得到$\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$. 式(6.1.14)～式(6.1.16)被称为 Ginzburg-Landau 方程. 如本节开始讨论过的那样，这组方程有对应于对称情况和对称自发破缺情况的简单解：

(1) $\psi=0$ 和 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$. 这是对称解，相应正常态.

(2) $\psi=\psi_0\equiv[-a(T)/b(T)]^{1/2}$，$\boldsymbol{A}=0$. 这是对称自发破缺的解，$\psi_0$ 是在 $T<T_c$ 情况下超导体内的常数序参量. 在此还没有考虑表面现象. 在表面附近，考虑 ψ 随垂直于表面的坐标 z 的变化. 忽略矢量势，并令 $\psi(z)=\psi_0\phi(z)$，得到 ϕ 所满足的方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m^* a(T)}\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}+\phi-\phi^3=0. \tag{6.1.17}$$

表征 ψ 在空间变化的参数被称为相干长度 ξ，定义为

$$\xi^2=-\frac{\hbar^2}{2m^* a(T)}. \tag{6.1.18}$$

满足边界条件 $\phi(z=0)=0$ 的方程式(6.1.17)的解是

$$\phi(z)=\tanh\frac{z}{\sqrt{2}\xi(T)},\quad z\geqslant 0. \tag{6.1.19}$$

可以看出，ψ 从表面经过距离 ξ 就达到超导体内的序参量值 ψ_0. 这个参数也表征 ψ 能够明显偏离 ψ_0 的空间范围，因此它也被称为愈合长度. 将 ψ 写作

$$\psi(\boldsymbol{r})=\sqrt{\rho(\boldsymbol{r})}\,e^{i\theta(\boldsymbol{r})}, \tag{6.1.20}$$

将式(6.1.20)代入式(6.1.16)，得到

$$\boldsymbol{j}=\frac{\hbar\rho}{m^*}\left[\nabla\theta-\frac{e^*}{\hbar c}\boldsymbol{A}\right]. \tag{6.1.21}$$

在将理论应用于超导的特定问题时，物理学家发现要想得到与实验符合的结果，理论的参数必须具有特殊的值：有效质量和电荷必须是 $m^*=2m$，$e^*=2e$，此处 m 和 e 分别是电子的质量和电荷，理论中的 ρ 必须是超导电子数密度的一半. 在当时序参量 ψ 的微观物理意义还是未知的. 只有在 Bardeen-Cooper-Schrieffer 的超导微观理论为物理学家所接受，以及 L. P. Gorkov[3] 给出 Ginzburg-Landau 方程的微观推导时，序参量 ψ 的意义才为人所知：它就是 Cooper 对的 Bose-Einstein 凝聚的波函数. 宏观量 ρ，$\boldsymbol{j}$，$\nabla\theta$ 都是物理可观测量，也是量子力学算符. 和式(6.1.3)相仿，有

$$\boldsymbol{j}=\rho\boldsymbol{v}, \tag{6.1.22}$$

$$m^*\boldsymbol{v}=\hbar\nabla\theta-\frac{e^*}{c}\boldsymbol{A}. \tag{6.1.23}$$

$\hbar\nabla\theta$ 相当于正则动量. 式(6.1.23)对于规范变换

$$\left.\begin{aligned}&\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}+\nabla\chi,\\&\theta\to\theta+\frac{e^*}{\hbar c}\chi\end{aligned}\right\} \tag{6.1.24}$$

是不变的. 式(6.1.23)有重要的推论. 在超导体内 ρ 是常数，因此连续方程是 $\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$. 用 Coulomb 规范 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ 并取式(6.1.18)的散度，得

$$\nabla^2\theta=0. \tag{6.1.25}$$

在大块材料中式(6.1.25)的解是

$$\theta=\text{const}. \tag{6.1.26}$$

因此式(6.1.22)就变为

$$\boldsymbol{j}=-\frac{e^*}{m^* c}\rho\boldsymbol{A}. \tag{6.1.27}$$

在 1935 年 H. London 和 F. London 为了解释超导现象，提出 $\boldsymbol{j}$ 必须与 $\boldsymbol{A}$ 成正比. 在这里，Ginzburg-Landau 理论导出了这个推论. 式(6.1.27)还能够解释 Meissner 效应. 在 Coulomb 规范 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ 中，Maxwell 方程 $\nabla\times\boldsymbol{B}=\frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}$ 给出 $\nabla^{2*}\boldsymbol{A}=-\frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}$，再用式(6.1.27)就得到

$$\nabla^2 \boldsymbol{A} = \lambda^2 \boldsymbol{A},$$

此处

$$\lambda^2 = \rho \frac{4\pi e}{mc^2}. \tag{6.1.28}$$

λ 就是 London 的穿透长度. λ 和 ξ 是 Ginzburg-Landau 理论的两个特征参数. 这个唯象理论在解释超导现象上非常成功[1,2],例如可以预言临界磁场强度、临界电流密度以及超导体和正常金属界面能量等. 这个表面能量在参数 $\kappa \equiv \lambda/\xi < 1/\sqrt{2}$ 时为正,在 $\kappa > 1/\sqrt{2}$ 时为负. 后面一种情况对于第二类超导体的存在具有关键意义. 第二类超导体是 A. Abrikosov 在 1952 年预言的. V. Ginzburg 和 A. Abrikosov 获得了 2003 年的诺贝尔物理奖.

考虑一个超导体,环中有磁通穿过. 在环体内没有电流,即 $j=0$,磁通是由在环表面上的超导流产生的. 因此取式(6.1.21)沿环内一个封闭曲线的积分,有

$$\oint \nabla\theta \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s} = \frac{e^*}{\hbar c}\oint \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s} = \frac{e^*}{\hbar c}\Phi. \tag{6.1.29}$$

由于波函数的单值性,左方是 θ 沿曲线转一圈的变化,它只能是 $2\pi n$. 因此磁通 Φ 必须是量子化的:

$$\Phi = \frac{\hbar c}{e^*} 2\pi n = n\frac{hc}{2e}. \tag{6.1.30}$$

这一点在第 3 章 3.1 节讨论 Aharonov-Bohm 效应时曾介绍过①.

ρ 和 θ 所满足的方程可以通过将 $\psi = \sqrt{\rho}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$ 代入 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2m^*}\left(-\mathrm{i}\,\hbar\nabla - \frac{e^*}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi + e^*\varphi\psi$$

而获得,此处 $(\varphi, \boldsymbol{A})$ 是四维电磁势. 结果是

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\boldsymbol{v}\cdot\nabla\rho - \rho\,\nabla\cdot\boldsymbol{v} = -\nabla\cdot(\rho\boldsymbol{v}), \tag{6.1.31}$$

$$\hbar\frac{\partial\theta}{\partial t} = -\frac{m^*}{2}\boldsymbol{v}^2 - e^*\varphi + \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{1}{\sqrt{\rho}}\nabla^2\sqrt{\rho}. \tag{6.1.32}$$

式(6.1.31)是代表流守恒的连续方程; 除最后一项外,式(6.1.32)是流体力学中无旋流体的运动方程. 式(6.1.32)最后一项是量子修正. 从式(6.1.20)可知

$$\nabla\times\left(\boldsymbol{v} + \frac{e^*}{m^* c}\boldsymbol{A}\right) = 0,$$

即

$$\nabla\times\boldsymbol{v} = -\frac{e^*}{m^* c}\boldsymbol{B}. \tag{6.1.33}$$

对理想流体有 $\nabla\times\boldsymbol{v}=0$(无旋),但对磁场中带电流体,就有式(6.1.33)存在.

6.2 耦合超导体,Josephson 效应

两块同样材料的超导体中间用绝缘体连结(图 6.2). 当绝缘体厚度够大时,两方的波函数是独立的. 当绝缘体厚度仅为 30Å 左右并在两块超导体上加电压 $U(U>2\Delta$,Δ 为超导体

① 式(3.1.16)中的 e 是绝对值,此后磁通量子中的 e 也都如此理解.

能隙)时,单个电子(更严格说是准粒子)能隧穿绝缘层,这就是 Giaever 隧穿. 当绝缘层进一步变薄到约 10Å,Cooper 对也能隧穿绝缘薄膜,这就是 Josephson 隧穿. B. D. Josephson 于 1962 年在理论上发现了这个效应[5,6],J. M. Rowell 在 1963 年对其得到实验证实[7]. 薄膜两侧 Cooper 对凝聚体的波函数是耦合的. 由于非对角长程序①也从一侧传到另一侧,波函数相角有一定关系. 令 ψ_1 和 ψ_2 代表两侧 Cooper 对凝聚体的波函数,它们满足以下耦合方程②:

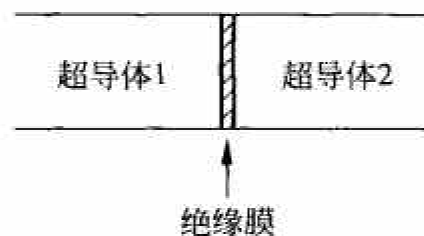


图 6.2　耦合超导体,Josephson 结

$$\left.\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} &= U_1\psi_1 + K\psi_2, \\ i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} &= U_2\psi_2 + K\psi_1. \end{aligned}\right\} \tag{6.2.1}$$

当两侧有电压时,$U_1-U_2=e^*U$,K 代表两侧的耦合. 为了方便,将能量零点设在$\frac{U_1+U_2}{2}$,这样就有 $U_1=\frac{e^*U}{2}$,$U_2=-\frac{e^*U}{2}$,式(6.2.1)变为

$$\left.\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} &= \frac{e^*U}{2}\psi_1 + K\psi_2, \\ i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} &= -\frac{e^*U}{2}\psi_2 + K\psi_1. \end{aligned}\right\} \tag{6.2.2}$$

将 $\psi_1=\sqrt{\rho_1}\,e^{i\theta_1}$,$\psi_2=\sqrt{\rho_2}\,e^{i\theta_2}$ 代入式(6.2.2)两式,分开实部与虚部,并定义

$$\phi = \theta_2 - \theta_1, \tag{6.2.3}$$

得到结两侧 ρ 和 θ 满足的方程:

$$\left.\begin{aligned} \dot{\rho}_1 &= \frac{2}{\hbar}K\sqrt{\rho_1\rho_2}\sin\phi, \\ \dot{\rho}_2 &= -\frac{2}{\hbar}K\sqrt{\rho_1\rho_2}\sin\phi, \end{aligned}\right\} \tag{6.2.4}$$

$$\left.\begin{aligned} \dot{\theta}_1 &= -\frac{K}{\hbar}\sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1}}\cos\phi - \frac{e^*U}{2\hbar}, \\ \dot{\theta}_2 &= -\frac{K}{\hbar}\sqrt{\frac{\rho_1}{\rho_2}}\cos\phi + \frac{e^*U}{2\hbar}. \end{aligned}\right\} \tag{6.2.5}$$

从式(6.2.4),有 $\dot{\rho}_1=-\dot{\rho}_2$,这是从 2 到 1 的粒子流. 方程(6.2.1)只给出两侧的耦合,$\dot{\rho}_1$ 和 $\dot{\rho}_2$ 代表两侧密度将要有的变化率. 实际上两块超导体是连接的,粒子流(电流)并不导致粒子(电荷)积累. 因此,在式(6.2.4)右方可设 $\rho_1=\rho_2=\rho_0$. 定义 $J_c=\frac{2K}{\hbar}\rho_0$,$\dot{\rho}_1=J$,由式(6.2.4)第一式给出

$$J = J_c\sin\phi. \tag{6.2.6}$$

隧穿超导电流方向与粒子流相反,相应的电流记为 I 和 I_c,有

---

① 请参阅本书 10.2 节.

② 参阅文献[4],21-9 节.

$$I = I_c \sin\phi. \tag{6.2.7}$$

I_c 称为临界电流,它决定于 Cooper 对密度及两侧的耦合. 式(6.2.5)给出 Josephson 关系

$$\dot{\phi} = \dot{\theta}_2 - \dot{\theta}_1 = \frac{e^* U}{\hbar}, \tag{6.2.8}$$

它导致

$$\phi(t) = \phi_0 + \frac{e^*}{\hbar}\int U \mathrm{d}t. \tag{6.2.9}$$

如果 U 为常数(直流电压),ϕ 随时间线性增长,I 是交变电流,则有

$$\phi(t) = \phi_0 + \frac{2eU}{\hbar}t, \tag{6.2.10}$$

$$J = J_c \sin(\phi_0 + \omega t), \tag{6.2.11}$$

$$\omega = \frac{2|e|U}{\hbar}. \tag{6.2.12}$$

式(6.2.12)给出 $\frac{\nu}{U} = 483.6\mathrm{MHz}/\mu\mathrm{V}$,一般情况下这是很高的频率. 如 $U=0$,则 ϕ 不随时间变化,$I = I_c \sin\phi_0$,仍有隧穿电流. Sn-$\mathrm{Sn}_x\mathrm{O}_y$-Sn Josephson 结在 $T=1.52\mathrm{K}$ 下的伏安特性曲线示于图 6.3. 横轴是电压,纵轴是电流,尺度注于图中. 从图可看出,在 $I < I_c$ 时,$U=0$. 一旦 I 超过 I_c(故名临界电流)就过渡到有电压的 Giaever 隧穿. 曲线的左支和右支是 Giaever 隧穿(有耗散),中间一支是 Josephson 隧穿(无耗散).

回顾一下在大块超导体内 $\boldsymbol{j}$ 与 $\nabla\theta$ 成正比(式(6.1.21)),此处在绝缘膜两侧 $\boldsymbol{j}$ 与相角差成正比(当相角差较小时). 因此,Josephson 效应是大块超导体内现象的自然扩展.

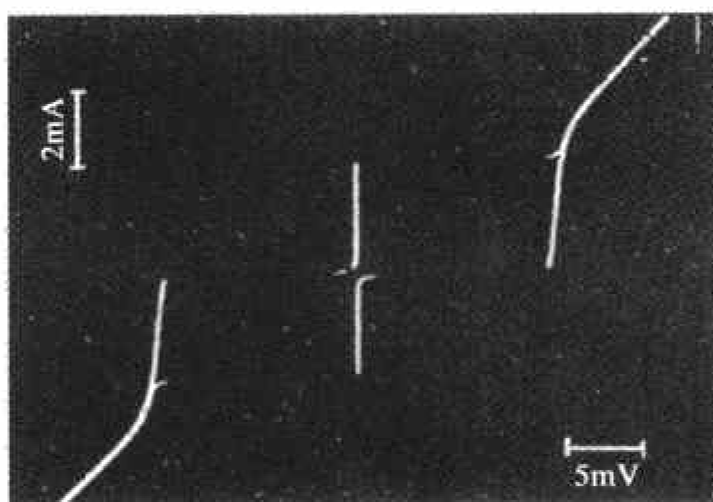


图 6.3 Sn-$\mathrm{Sn}_x\mathrm{O}_y$-Sn Josephson 结的伏安特性曲线($T=1.52\mathrm{K}$)

体系的能量变化等于电压所作的功,这个功是可逆的(非耗散的):

$$\mathrm{d}V(\phi) = - IU\mathrm{d}t, \tag{6.2.13}$$

从 Josephson 关系式(6.2.8)得

$$\dot{\phi} = -\frac{2|e|U}{\hbar} = -\frac{2\pi c}{\Phi_0}U, \tag{6.2.14}$$

此处 Φ_0 是磁通量子,

$$\Phi_0 = \frac{hc}{2|e|}. \tag{6.2.15}$$

式(6.2.13),式(6.2.14)给出

$$dV = \frac{I}{c}\frac{\Phi_0}{2\pi}d\phi = \frac{I_c}{c}\sin\phi\frac{\Phi_0}{2\pi}d\phi,$$

$$V(\phi) = -\frac{I_c}{c}\frac{\Phi_0}{2\pi}\cos\phi. \tag{6.2.16}$$

$V(\phi)$称为 Josephson 耦合能，它在 $\phi=0$ 时最小. 以上设积分常数为 0. 超导电流和 V 的关系是

$$I = \frac{2\pi c}{\Phi_0}\frac{\partial V(\phi)}{\partial \phi}. \tag{6.2.17}$$

在平衡条件下（体系状态不随时间变化、无耗散），通过结的超导电流和在"流偏置 Josephson 结"(current biased Josephson junction，CBJ)的外电流相同. 如果在体系能量（式(6.2.16)）上加上一个外电流项 $-I_{\text{ext}}\phi\dfrac{\Phi_0}{2\pi c}$①，使总能量在平衡时达到极小，就能得到这个条件. Josephson 耦合能是

$$V(\phi) = -\frac{I_c}{c}\frac{\Phi_0}{2\pi}\cos\phi - \frac{I_{\text{ext}}}{c}\phi\frac{\Phi_0}{2\pi}. \tag{6.2.18}$$

在平衡条件下 V 达到极小：

$$\left.\frac{\partial V(\phi)}{\partial \phi}\right|_{\text{eq}} = 0, \tag{6.2.19}$$

它导致

$$I_{\text{ext}} = I_c\sin\phi, \tag{6.2.20}$$

即在平衡时，超导电流与外电流相等. 用 Josephson 结超导环可以演示宏观的 Aharonov-Bohm 效应. 如图 6.4 所示，超导环中置两个 Josephson 结 a 与 b. 磁通 Φ 局限于通过环洞的管中. 虽然管外没有场强 $\boldsymbol{B}$，但矢势 $\boldsymbol{A}$ 遍及各处. 令 J_a 和 J_b 为通过结 a 与 b 的流，总流强 $J_{\text{tot}}=J_a+J_b$ 将随 Φ 的变化显示 J_a 与 J_b 的干涉效应，沿路径 PaQ 和 PbQ 波函数相位的变化分别是

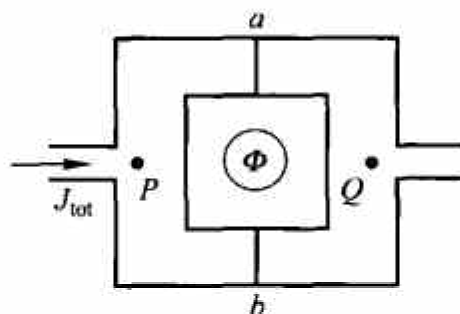


图 6.4 Josephson 结超导环

$$\left.\begin{aligned}\Delta\theta(PaQ) &= \phi_a + \frac{e^*}{\hbar c}\int_{P(a)}^{Q}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s},\\ \Delta\theta(PbQ) &= \phi_b + \frac{e^*}{\hbar c}\int_{P(b)}^{Q}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s},\end{aligned}\right\} \tag{6.2.21}$$

此处 ϕ_a 和 ϕ_b 是跨越结 a 和 b 的相位变化，线积分是和路径有关的，路径在括号中标明. P 和 Q 间的相位差是唯一的，因此式(6.2.21)的两个表达式应该相等，即有

$$\begin{aligned}\phi_b - \phi_a &= \frac{e^*}{\hbar c}\left(\int_{P(a)}^{Q} - \int_{P(b)}^{Q}\right)\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s} \\ &= \frac{e^*}{\hbar c}\oint\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s} = -\frac{e^*}{\hbar c}\int\boldsymbol{B}\cdot d\boldsymbol{s} = -\frac{e^*}{\hbar c}\Phi.\end{aligned} \tag{6.2.22}$$

这里的约定是当 $\boldsymbol{B}$ 透过纸面朝向读者时，Φ 是正的，这相当于封闭线积分是反时针方向的. 因为 $e^*=2e$，为了方便可将式(6.2.22)写作

$$\begin{aligned}\phi_a &= \phi_0 + \frac{e}{\hbar c}\Phi,\\ \phi_b &= \phi_0 - \frac{e}{\hbar c}\Phi.\end{aligned} \tag{6.2.23}$$

---

① 可以考虑这项能量是 $\int I_{\text{ext}}U\,dt = -I_{\text{ext}}\dfrac{\Phi_0}{2\pi c}\int\dot{\phi}\,dt = -I_{\text{ext}}\dfrac{\Phi_0}{2\pi c}\phi$.

Josephson 流和相位差的关系就是

$$\left.\begin{aligned} J_a &= J_c\sin\left(\phi_0 + \frac{e}{\hbar c}\Phi\right), \\ J_b &= J_c\sin\left(\phi_0 - \frac{e}{\hbar c}\Phi\right), \end{aligned}\right\} \tag{6.2.24}$$

总 Josephson 流是

$$J_{\text{tot}} = J_a + J_b = 2J_c\sin\phi_0\cos\frac{e\Phi}{\hbar c}. \tag{6.2.25}$$

J_{tot}是 Φ 的周期函数,它取极大值的条件是

$$\Phi = n\frac{\pi\hbar c}{e} = n\Phi_0. \tag{6.2.26}$$

这个现象是 Josephson 流 J_a 和 J_b 的干涉,它们间的相位差是由 Φ(亦即矢量势 $\boldsymbol{A}$)调节的,而 Josephson 流是在没有磁场强度的区域通过的. 通过双结的 Josephson 流(作为通量的函数)的测量是由 R. C. Jaklevic[8]完成的,结果示于图 6.5.

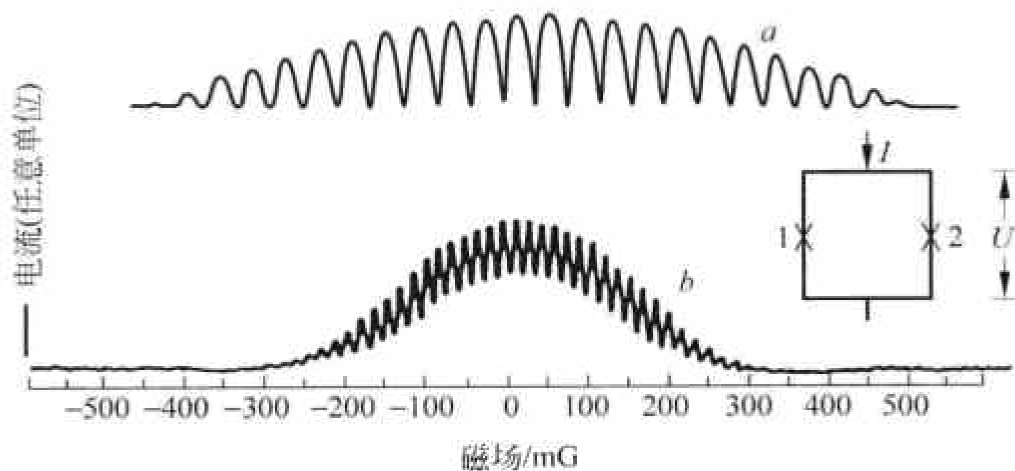


图 6.5 Josephson 流与环中磁通关系[8]

曲线 a 与 b 所加场强不同. 曲线 a 中电流的两个峰值间其场强差为 3.95mg,b 中为 16mG

在 3.1 节讨论过,体系在有矢量势 $\mathbf{A}$ 时的波函数 ψ 和无矢量势时的波函数 ψ_0 的关系是

$$\psi(X) = \psi_0(X)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{e^*}{\hbar c}\int^x \mathbf{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}\right) \tag{6.2.27}$$

因此结两侧波函数的标量积是

$$\langle 2 \mid 1\rangle = \langle 2 \mid 1\rangle_0\exp\left(-\frac{\mathrm{i}e^*}{\hbar c}\int_1^2 \mathbf{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}\right). \tag{6.2.28}$$

在有矢量势时方程式(6.2.2)应该写作

$$\left.\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} &= \frac{e^*U}{2}\psi_1 + K\left[\exp\left(-\mathrm{i}\frac{e^*}{\hbar c}\int_1^2 \mathbf{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}\right)\right]\psi_2, \\ \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} &= -\frac{e^*U}{2}\psi_2 + K\left[\exp\left(-\mathrm{i}\frac{e^*}{\hbar c}\int_1^2 \mathbf{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}\right)\right]\psi_1, \end{aligned}\right\} \tag{6.2.29}$$

从此得到的 Josephson 流和 Josephson 关系分别是

$$J = J_c\sin\left(\phi + \frac{e^*}{\hbar c}\int_1^2 \mathbf{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}\right), \tag{6.2.30}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\phi + \frac{e^*}{\hbar c}\int_1^2 \mathbf{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}\right) \equiv \frac{\partial}{\partial t}\phi^* = \frac{e^*}{\hbar}U. \tag{6.2.31}$$

即在有矢量势存在时，相位差 ϕ 由"规范不变的相位差"ϕ^* 取代.

6.3　置有 Josephson 结的超导环，SQUID

图 6.6 绘出一超导环，中有一 Josephson 结. 它是"超导量子干涉装置"(superconducting quantum interference device，SQUID)的主要部分. 以下我们就将这个置有 Josephson 结的超导环也称为 SQUID. 它和 6.2 节中的电流偏置 Josephson 结一样，都是 Josephson 结物理研究和应用的基本装置. 在环中设置 Josephson 流，它在环洞中产生通量 Φ. Josephson 电流 $\boldsymbol{J}_s$ 和 Cooper 对粒子流 $\boldsymbol{J}$ 的关系是

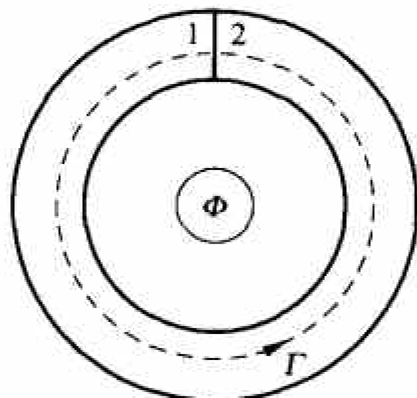


图 6.6　SQUID 示意图

$$\boldsymbol{J}_s = -2e\boldsymbol{J}. \tag{6.3.1}$$

据式(6.1.21)，有

$$\boldsymbol{J}_s = -\frac{e\hbar\rho}{m}\left(\nabla\theta + \frac{2|e|}{\hbar c}\boldsymbol{A}\right). \tag{6.3.2}$$

在环中 $\boldsymbol{J}_s = 0$，因此

$$\nabla\theta = -\frac{2|e|}{\hbar c}\boldsymbol{A} = -\frac{2\pi}{\Phi_0}\boldsymbol{A}. \tag{6.3.3}$$

将式(6.3.3)沿图中路径积分，设超导流是反时针方向的. 考虑波函数的单值性，左方给出 $2\pi n$：

$$2\pi n = -\frac{2\pi}{\Phi_0}\int_{1\Gamma}^{2}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s} + \theta_1 - \theta_2, \tag{6.3.4}$$

此处的约定是以超导电流方向(从 2 到 1)定义 $\phi = \theta_1 - \theta_2$. 当有矢量势时，规范不变相差是

$$\phi^* = \phi + \frac{2\pi}{\Phi_0}\int_{2}^{1}{}_{J}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s}, \tag{6.3.5}$$

在式(5.6.3)和式(5.6.4)的积分中 Γ 代表沿路径 Γ，J 代表跨过结. 以上二式导致

$$\begin{aligned}\phi^* &= 2\pi n + \frac{2\pi}{\Phi_0}\left[\int_{1\Gamma}^{2}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s} + \int_{2J}^{1}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s}\right] \\ &= 2\pi n + \frac{2\pi}{\Phi_0}\oint\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{s} \\ &= 2\pi n + \frac{2\pi}{\Phi_0}\Phi.\end{aligned} \tag{6.3.6}$$

将式(6.3.6)与式(6.1.30)相比，发现它们本质的区别在于：式(6.1.30)是一个超导环表面上的超导流产生的穿过环洞的磁通量子化；式(6.3.6)表明有了 Josephson 结后，超导电流产生穿过环洞的磁通不是量子化的. 随着结的膜厚减小，两侧的耦合加强，Φ 愈加接近量子化数值.

考虑在"SQUID"上加外磁通 Φ_{ext}. 它的作用是可以调整体系的势能，为宏观磁通量 Φ 准备量子隧穿或相干的环境. 令 L 代表环的自感量. Φ_{ext} 将在环内感生电流，它会部分屏蔽外磁通，最后的磁通为 Φ，因此有①

$$\Phi = \Phi_{ext} - LI. \tag{6.3.7}$$

由于有 Josephson 结，超导电流 I 由结确定，

$$I = I_c\sin\phi^* = I_c\sin\left(2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right). \tag{6.3.8}$$

---

① 本章以下内容直至 6.6 节结束，为了和有关的引用文献(数量较大)保持一致，公式表达采用 SI 制.

环的能量由两部分构成：

$$V(\Phi) = -I_c\frac{\Phi_0}{2\pi}\cos 2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0} + \frac{(\Phi_{ext}-\Phi)^2}{2L}. \tag{6.3.9}$$

第一项是耦合能，第二项是自感量的能量$\frac{1}{2}LI^2$. 式(6.3.9)与 CBJ 的式(6.2.18)相当. 同样，求 $V(\Phi)$的极小值给出式(6.3.7). 从环能量可以得到环的稳态和准稳态，即求 $V(\Phi)$的一系列极小值. 对 $\Phi_{ext}=0$，将式(6.3.9)改写为

$$\frac{V(\Phi)}{\Phi_0^2/2L} = \left(\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2 - \frac{LI_c}{\pi\Phi_0}\cos 2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}. \tag{6.3.10}$$

图 6.7 画出作为 Φ/Φ_0 函数的$\frac{V(\Phi)}{\Phi_0^2/2L}$. 图(a)是$\frac{LI_c}{\pi\Phi_0}=2$ 的情况，它有 5 个极小，包括 $\Phi=0$ 的稳态和 4 个准稳态. 图(b)是$\frac{LI_c}{\pi\Phi_0}=3$，图(c)是$\frac{LI_c}{\pi\Phi_0}=4$，它们分别有 7 个和 9 个极小值. Φ_{ext}可以连续取值. 为了简便，取 $\Phi_{ext}=n\Phi_0$，它使稳态移到 $n\Phi_0$ 处. 式(6.3.9)可以改写为

$$V(\Phi) = \frac{(\Phi-n\Phi_0)^2}{2L} - \frac{I_c\Phi_0}{2\pi}\cos\left(2\pi\frac{\Phi-n\Phi_0}{\Phi_0}\right). \tag{6.3.11}$$

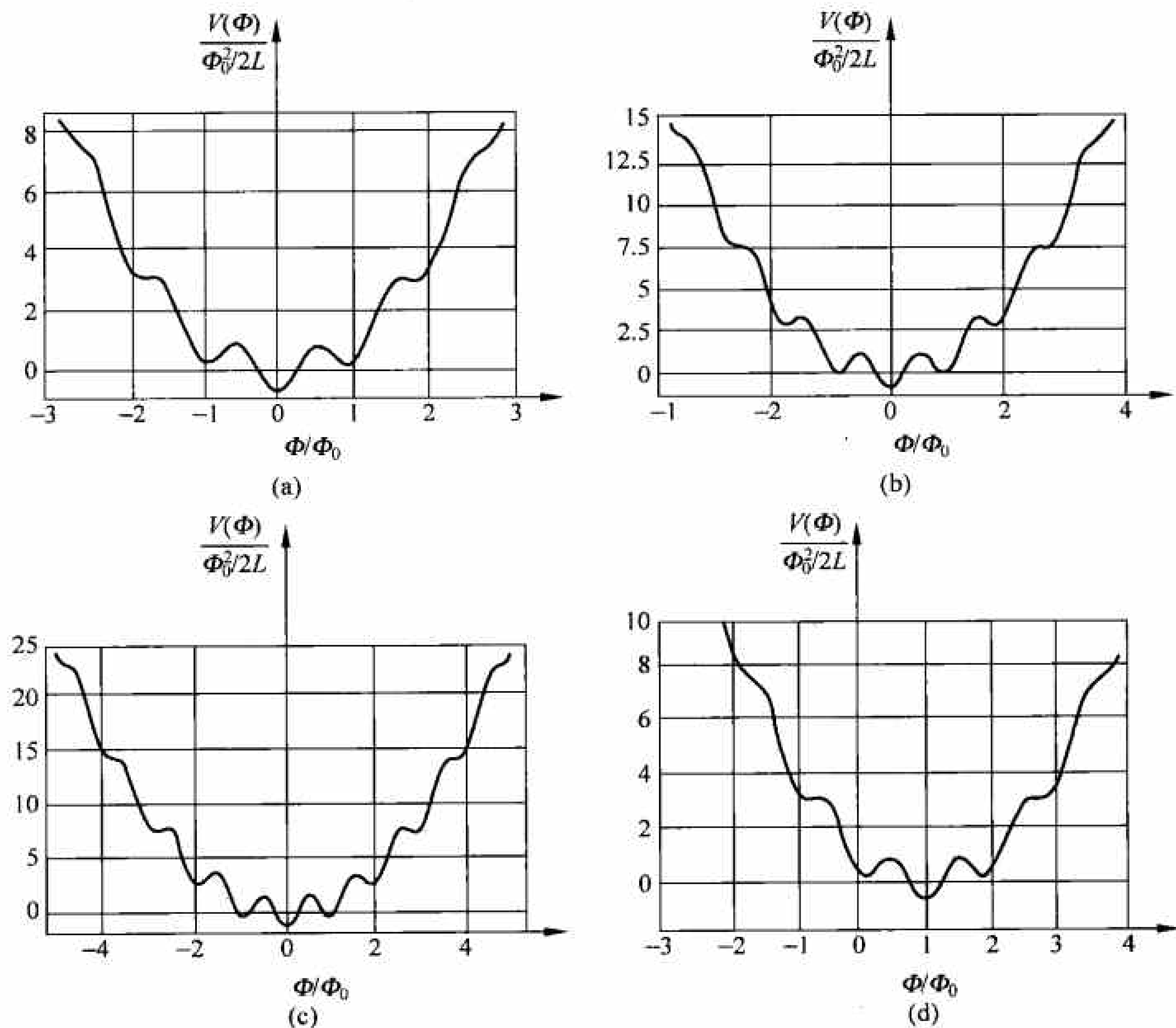


图 6.7 SQUID 的稳态和准稳态

图 6.7(d)画出 $\Phi_{ext}=\Phi_0$，$\frac{I_c\Phi_0}{2\pi}=2$ 的情况. 从图中可以看出，离稳态愈远的准稳态其阱愈浅. Φ_{ext}则可以用来调整在 $\Phi=0$ 处准稳态的阱深. 例如 $\Phi_{ext}=\Phi_0$，在 $\Phi=0$ 处是第一个准稳态；$\Phi_{ext}=2\Phi_0$，在 $\Phi=0$ 是第二个准稳态. 在 $\Phi_{ext}=3\Phi_0$ 时 $\Phi=0$ 处已无阱了，体系就变得不稳定，体系将沿着 $V(\Phi)$ 曲线下滑.

$\Phi_{ext}=\frac{1}{2}\Phi_0$ 提供了一个有趣的情况. 令

$$\tilde{\Phi}=\Phi-\frac{1}{2}\Phi_0,\tag{6.3.12}$$

则有

$$\frac{V(\tilde{\Phi})}{\Phi_0^2/2L}=\left(\frac{\tilde{\Phi}}{\Phi_0}\right)^2+\frac{LI_c}{\pi\Phi_0}\cos\left(2\pi\frac{\tilde{\Phi}}{\Phi_0}\right).\tag{6.3.13}$$

图 6.8 绘出式(6.3.13)左方与 $\tilde{\Phi}/\Phi_0$ 的关系曲线. 它是一个双阱，即可以实现二能级量子相干的情况.

若 SQUID 或 CBJ 的状态位于 $V(\Phi)$或 $V(\phi)$曲线上某一点，随时间进行它将如何发展呢？这需要研究 Φ 或 ϕ 的动力学. J. Kurkijärvi 给出一个"电阻分流的结模型"(resistively shunted junction model，简称 RSJ 模型)[9]. 令通过 Josephson 结的电流为 I_J. 和结并联的还有电阻，有正常(耗散)电流 I_N 通过它. 结也有电容，因此有位移电流 I_D. 整个 CBJ 可以模型化于图 6.9 中. 式(6.2.30)和式(6.3.6)给出

$$I_J=I_c\sin\phi^*=I_c\sin\left(2\pi n+\frac{2\pi}{\Phi_0}\Phi\right)=I_c\sin\frac{2\pi}{\Phi_0}\Phi.\tag{6.3.14}$$

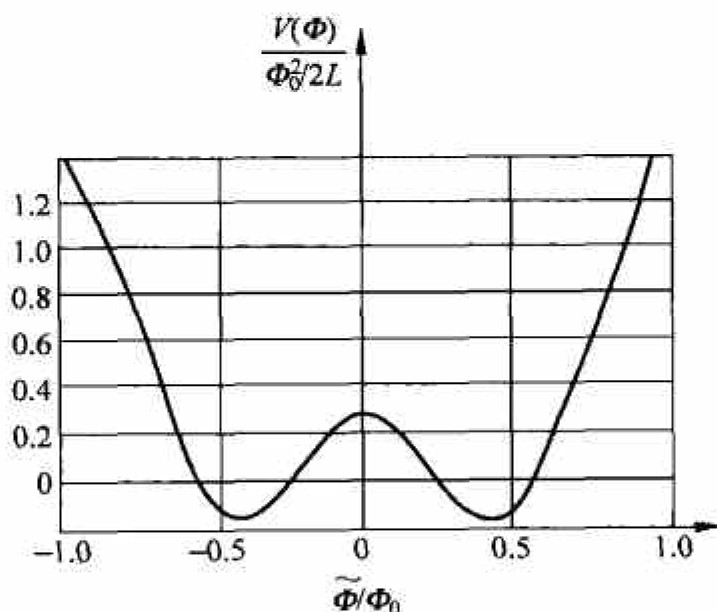


图 6.8　双阱

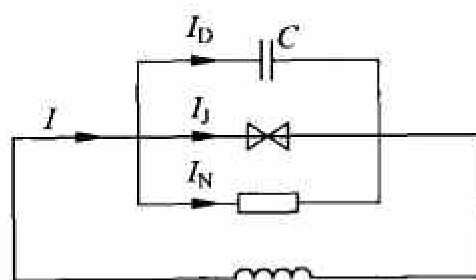


图 6.9　RSJ 模型

据式(6.2.14)①和式(6.3.6)得出

$$I_N=\frac{U}{R}=\frac{1}{R}\left(\frac{\Phi_0}{2\pi}\dot{\phi}^*\right)=\frac{1}{R}\dot{\Phi},\tag{6.3.15}$$

$$I_D=C\dot{U}=C\left(\frac{\Phi_0}{2\pi}\ddot{\phi}^*\right)=C\ddot{\Phi}.\tag{6.3.16}$$

① 此处约定 $\phi=\theta_1-\theta_2$，与 5.2 节差一个符号，故应将 U 反号.

要写出 Φ 的运动方程,先考虑电容储能,它是$\frac{1}{2}CU^2=\frac{1}{2}C\dot{\Phi}^2$,作为动能项表明质量是 C. 运动方程本应就是

$$C\ddot{\Phi}=-\frac{\partial V(\Phi)}{\partial \Phi}. \tag{6.3.17}$$

但体系有耗散(I_N 流经电阻 R). 以下将证明①这一项是$\frac{\dot{\Phi}}{R}$,是和速度成正比的. 运动方程是

$$C\ddot{\Phi}+\frac{\dot{\Phi}}{R}=-\frac{\partial V}{\partial \Phi}=-I_c\sin 2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}+\frac{(\Phi_{ext}-\Phi)}{L}. \tag{6.3.18}$$

由式(6.3.14)~式(6.3.16),知式(6.3.18)就是

$$I_D+I_N+I_J=I. \tag{6.3.19}$$

在 $\Phi_{ext}=0$ 情况下,若 Φ 离稳态 $\Phi=0$ 不远,从式(6.3.18)得

$$\ddot{\Phi}=-\frac{1}{C}\left(\frac{1}{L}+I_c\frac{2\pi}{\Phi_0}\right)\Phi, \tag{6.3.20}$$

在稳态附近振荡的角频率是

$$\omega=\frac{1}{\sqrt{LC}}\left(1+\frac{2\pi LI_c}{\Phi_0}\right)^{1/2}\equiv\frac{1}{\sqrt{LC}}(1+\beta_L)^{1/2}. \tag{6.3.21}$$

式(6.3.21)定义了重要参数 β_L. 为了以下讨论,定义 SQUID 的参数[7]. 一个准稳态(图 6.10(a))的阱深以 V_0 表示,在阱底附近振动的角频率以 ω_0 表示. 增加 Φ_{ext} 至 Φ_{x0},此时在原准稳态处的阱完全消失,准稳态不复存在(图 6.10(b)). 令 $\delta\Phi_x=\Phi_{x0}-\Phi_{ext}$,$\omega_{LC}=\frac{1}{\sqrt{LC}}$,有

$$\left.\begin{aligned}\omega_0&=\omega_{LC}(2\pi\sqrt{2})^{1/2}\left(\frac{LI_c}{\Phi_0}\right)^{1/4}\left(\frac{\delta\Phi_x}{\Phi_0}\right)^{1/4},\\V_0&=\frac{2\sqrt{2}}{3\pi}\frac{\Phi_0^2}{L}\left(\frac{\Phi_0}{LI_c}\right)^{1/4}\left(\frac{\delta\Phi_x}{\Phi_0}\right)^{3/2}.\end{aligned}\right\} \tag{6.3.22}$$

对双阱(图 6.11),阱距为 $\Delta\Phi$,阱深为 ΔV,在阱底振动角频率为 ω_0,即有

$$\left.\begin{aligned}\Delta\Phi&=\frac{\Phi_0}{\pi}[6(\beta_L-1)/\beta_L]^{1/2},\\\Delta V&=\frac{3}{8\pi^2}\frac{\Phi_0^2}{L}\frac{(\beta_L-1)^2}{\beta_L},\\\omega_0&=[2(\beta_L-1)]^{1/2}\omega_{LC}.\end{aligned}\right\} \tag{6.3.23}$$

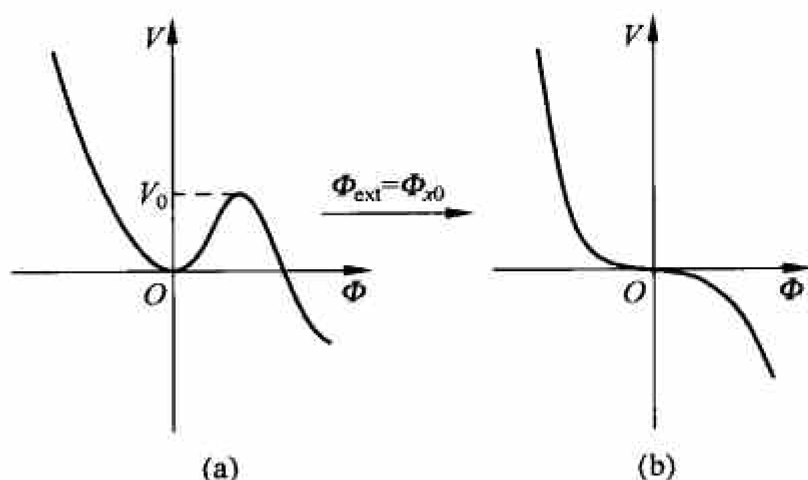


图 6.10 磁通改变导致势能曲线变化

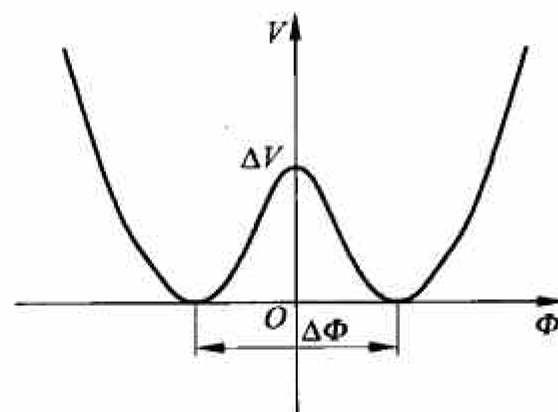


图 6.11 双阱参数

① 参见式(6.5.15).

6.4 Josephson 体系的宏观量子隧穿和宏观量子相干

SQUID 中的磁通量 Φ 是宏观量，在 SQUID 上加有外磁通给它安排好了势阱. 关键是式(6.3.18)是经典方程，Φ 是常数. 问题是，将 Φ 作为量子力学量处理的条件是什么？作为常数的 Φ 应是这个力学量的平均值. 在平均值附近的量子涨落是否有意义？不考虑耗散，将 Φ 当作广义坐标. 体系的 Lagrange 量是

$$L = \frac{1}{2}C\dot{\Phi}^2 - V(\Phi). \tag{6.4.1}$$

共轭动量是

$$p_\Phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\Phi}} = C\dot{\Phi}. \tag{6.4.2}$$

据式(6.2.31)，式(6.3.5)，有

$$p_\Phi = C\frac{\Phi_0}{2\pi}\dot{\phi} = -CU = -Q, \tag{6.4.3}$$

此处 Q 为电容中所储的电荷. 考虑在 $\Phi_{\text{ext}}=0$ 情况，SQUID 处于稳态，$\Phi=0$. Φ 的量子涨落可以估计如下：

$$\frac{1}{2}C\omega^2\langle(\Delta\Phi)^2\rangle = \frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}\hbar\omega, \tag{6.4.4}$$

左方是谐振子势能$\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 的类比，右方是零点能的一半. 因此有

$$\langle(\Delta\Phi)^2\rangle = \frac{\hbar}{2C\omega}. \tag{6.4.5}$$

Heisenberg 不确定关系是

$$\Delta\Phi\cdot(e\Delta N) \geqslant \frac{\hbar}{2}, \tag{6.4.6}$$

N 代表结两侧不平衡的电子数目，$eN=Q$. 式(6.4.6)给出

$$\langle(\Delta N)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4e^2}\frac{1}{\langle(\Delta\Phi)^2\rangle} = \frac{\hbar C\omega}{2e^2}. \tag{6.4.7}$$

定义

$$\lambda \equiv (8CI_c\Phi_0^3/\pi^3\hbar^2)^{1/2} = (8CI_c\hbar/e^3)^{1/2}, \tag{6.4.8}$$

作为使量子效应显著的特征参数. 从式(6.3.21)，在 $\beta_L \gg 1$ 时有

$$\omega \approx \left(\frac{2\pi I_c}{C\Phi_0}\right)^{1/2},$$

$\langle(\Delta N)^2\rangle$和$\langle(\Delta\Phi)^2\rangle$都可以通过 λ 表示：

$$\left.\begin{aligned}\langle(\Delta N)^2\rangle &= \frac{\lambda}{4},\\ \langle(\Delta\Phi)^2\rangle &= \frac{\hbar^2}{4e^2}\frac{4}{\lambda} = \frac{\Phi_0^2}{\pi^2\lambda}.\end{aligned}\right\} \tag{6.4.9}$$

若 $\lambda\gg1$，$\Delta N\gg1$，则 $\Delta\Phi$ 可以很小，即量子涨落不重要，这是对应原理极限. 如果 $\lambda\approx1$，N 可以很大，而 ΔN 可以忽略，Φ 值则很分散，这是量子力学的情况. 为了使量子效应能够表现出

来，除 $\lambda\approx 1$ 以处，还要它必须比竞争者更为有利. 从式(6.3.11)看，势曲线的局部起伏（造成阱以产生亚稳态）是$\frac{I_c\Phi_0}{\pi}$. 如果体系处于足够高的温度以至于 $kT\gtrsim\frac{I_c\Phi_0}{\pi}$时①，可以造成阱的热超越. 因此还必须要求 $kT<\frac{I_c\Phi}{\pi}$. 合起来条件是

$$1\approx\left(\frac{8CI_c\hbar}{e^3}\right)^{1/2}>\left(\frac{8C}{e^2}kT\right)^{1/2},$$

它要求

$$C\lesssim\frac{e^2}{8kT}. \tag{6.4.10}$$

这个关系可以解释为一个电子在电容中的能量$\frac{e^2}{2C}$必须小于 $4kT$. 对 $T=1\text{mK}$，$C\lesssim 0.1\text{pF}$，这在工艺上是容易达到的.

一个明显的量子力学行为是势垒的隧穿. 在一个准稳态附近，势能曲线如图 6.12 所示，此处用坐标 q 代表 Φ. 体系在 $T=0$ 条件下的隧穿率可以用量子力学 WKB 方法计算，即

$$P=\text{const}\omega_0\left(\frac{V_0}{\hbar\omega_0}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_0^{q_0}\sqrt{2mV(q)}\,\mathrm{d}q\right]. \tag{6.4.11}$$

Callan 和 Coleman 的瞬子法可以给出更精确的结果②. 图 6.12 的势能曲线可以用“二次加三次”势近似：

$$V(q)=\frac{1}{2}M\omega_0^2q^2-\beta q^3$$
$$=\frac{27}{4}V_0\left[\left(\frac{q}{q_0}\right)^2-\left(\frac{q}{q_0}\right)^3\right], \tag{6.4.12}$$

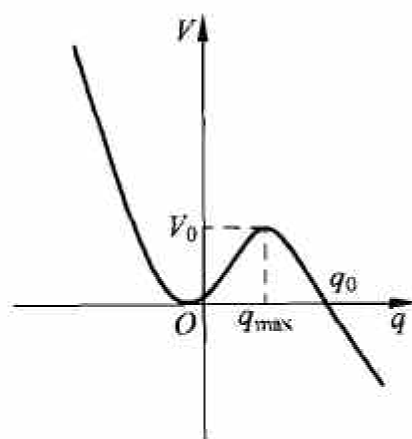


图 6.12 准稳态附近势能曲线

参数关系是

$$q_0=\frac{M\omega_0^2}{2\beta},\quad V_0=\frac{1}{54}\frac{(M\omega_0^2)^3}{\beta^2}.$$

对这种势，瞬子法计算给出

$$P=\omega_0\left(\frac{60V_0}{\hbar\omega_0}\right)^{1/2}\left(\frac{18}{5\pi}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{36}{5}\frac{V_0}{\hbar\omega_0}\right). \tag{6.4.13}$$

“二次加三次”势严格地说是“病态”的，因为势能曲线没有下边界. 这样系统就能不断往低能态跃迁并释放能量，但在真实体系（图 6.7）并没有这种情况. 回顾 5.4 节的方法，回弹解对经典作用量的贡献积分到 q_0（回弹点）为止. 实际上 q_0 以外的势对结果影响不大，只在计算前置因子的行列式比时 $V''(X)$ 有作用. 因此可以认为一个合理的势结果差别不大. 在有限温度时“热激活”衰变率是[11]

$$P_{cl}=\text{const}\omega_0\exp\left(-\frac{V_0}{kT}\right). \tag{6.4.14}$$

要使热超越不干扰量子隧穿必须要有

$$kT\ll a_0\hbar\omega_0,$$

① 符号$\gtrsim$代表左右二量属于同量级，但左方大于右方. $\lesssim$代表两个同量级的量，右方大于左方.

② 见本书 5.4 节及附录.

a_0 是个常数，对二次加三次势 $a_0=\frac{5}{36}$. 当然还要综合考虑 ω_0 和 V_0 的条件. A. J. Leggett 指出 $T<100\text{mK}$ 就可以实现量子隧穿.

图 6.8 的双阱提供了宏观量子相干的可能性，这是量子力学中二能级问题(本书 5.2 节). 如果二阱间势垒非常高，左右阱内有相同的状态 ψ_L 与 ψ_R，则它们的能量相同. 但若势垒有限，由于势垒隧穿，这两个状态是要混合的，即能量本征态如下：

$$\left.\begin{aligned}&\text{基态} && \psi_0=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_L+\psi_R),\\ &\text{激发态} && \psi_e=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_L-\psi_R).\end{aligned}\right\} \tag{6.4.15}$$

为了讨论方便，这里用 WKB 方法给出的能级劈裂公式

$$\Gamma=\text{const}\ \omega_0\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_0^R\sqrt{2CV(\Phi)}\,\mathrm{d}\Phi\right], \tag{6.4.16}$$

$$E_e-E_0=\hbar\Gamma.$$

若在 t_0 时体系处于 ψ_L，则有

$$\begin{aligned}\psi(t)&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_0\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_0}{\hbar}t\right)+\psi_e\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_e}{\hbar}\right)\right)\\ &=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_L\left(\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_0}{\hbar}t\right)+\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_e}{\hbar}t\right)\right)\right.\\ &\quad\left.+\psi_R\left(\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_0}{\hbar}t\right)-\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_e}{\hbar}t\right)\right)\right].\end{aligned} \tag{6.4.17}$$

令 $W_L(t)$，$W_R(t)$ 分别为在时间 t 体系处于左阱和右阱的几率，

$$\left.\begin{aligned}W_L(t)&=|\langle\psi_L\mid\psi(t)\rangle|^2,\\ W_R(t)&=|\langle\psi_R\mid\psi(t)\rangle|^2.\end{aligned}\right\} \tag{6.4.18}$$

式(6.4.17)给出

$$\frac{W_L(t)}{W_R(t)}=\frac{|1+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Gamma t}|^2}{|1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Gamma t}|^2}=\frac{1+\cos\Gamma t}{1-\cos\Gamma t}.$$

用 $W_L+W_R=1$，即得

$$\left.\begin{aligned}W_L(t)&=\frac{1}{2}(1+\cos\Gamma t),\\ W_R(t)&=\frac{1}{2}(1+\cos\Gamma t).\end{aligned}\right\} \tag{6.4.19}$$

对 SQUID，L 和 R 分别指 $\tilde{\Phi}=-\frac{\Phi_0}{2}$ 和 $\tilde{\Phi}=\frac{\Phi_0}{2}$. 它们是宏观上可以区分的. 正是实验室中的 Schrödinger 猫. 讨论在实验上实现的可能性时，起重要作用的是参数 β_L(式(6.3.21)). 对 $\beta_L\gg1$ 的情况，式(6.4.16)的指数上积分是 $\mathrm{e}^{-\lambda/\sqrt{2}}$[10]，由于 $\beta_L\gg1$，相应的 λ 也大，是远离量子体制的. 因此要研究 $\beta_L\gtrsim1$ 的情况. 令 $\beta_L-1\equiv K$，式(6.3.23)给出

$$\begin{aligned}\Delta V&\approx\frac{3}{8\pi^2}\frac{\Phi_0^2}{L}K^2,\\ \omega_0&=2K^{1/2}\omega_{LC}.\end{aligned} \tag{6.4.20}$$

指数上积分可以参照二次加三次势的计算再考虑因子 1/2，有

$$\Gamma \approx \omega_0 \exp\left(-\frac{18}{5}\frac{\Delta V}{\hbar\omega_0}\right).$$

将式(6.4.20)代入，有

$$\Gamma \approx \omega_0 \exp\left(-\frac{1}{2}K^{3/2}\lambda\right). \tag{6.4.21}$$

由于热超越率是

$$\Gamma_{cl} \approx \omega_0 e^{-\Delta V/kT},$$

必须要求 $\Delta V \gg kT$，经典现象才不致干扰量子相干. 式(6.4.20)进一步简化，有 $\Delta V \approx \frac{3}{4}K^2 I_c \Phi_0$，因此条件是

$$\frac{3}{4}K^2 I_c \Phi_0 \gg kT. \tag{6.4.22}$$

就量子相干本身而言，式(6.4.21)指数上 $K^{3/2}\lambda$ 不能太大. 如要求它是 $O(1)$，有

$$(K^{3/2}\lambda)^{4/3} = K^2\lambda^{4/3} \approx 1.$$

再和式(6.4.22)，即和式

$$\frac{kT}{I_c\Phi_0} \ll \frac{3}{4}K^2$$

一并考虑，就得

$$\frac{kT}{I_c\Phi_0} \ll \lambda^{-4/3}. \tag{6.4.23}$$

由于 $\lambda \propto \sqrt{C}$，$\lambda \approx 1$ 的条件，要求 $C \approx 10^{-14}\mathrm{F} = 10^{-2}\mathrm{pF}$，这已是很高的要求. 到此，主角还没有出场. 宏观体系的特点便是体系不能和环境隔绝，环境的影响还会带来进一步的要求.

本节及 6.5 节内容取自文献[10]，[11].

6.5 环境对宏观量子现象的影响

宏观体系的基本特点是它和环境的相互作用. 一般情况下它是不可逆的，并倾向于抹掉量子力学的相干. 讨论宏观体系的量子现象就必须考虑环境的影响. 以 SQUID 或 CBJ 为例，即使在 $T \ll T_c$ 时，正常电子的数目仍是有限的，它们导致耗散. RSJ 模型是成功的，其中就包括了耗散项，因此耗散从开始便应进入理论. “开放的量子体系”是近年来发展得很快的一个方向[14]. 早年 R. P. Feynman 和 F. L. Vernon 提出过量子体系和线性耗散系统相互作用理论[15]，A. Leggett[10,11,12]在此基础上系统地研究了 Josephson 系统宏观量子性质与耗散的关系，在量子耗散理论中是很有影响的. 对 SQUID 和 Josephson 结并联的电阻是可以测量的，这是唯一的已知宏观参数. 但宏观量子效应要从量子理论出发，宏观参数只是微观相互作用的结果，如何将它和微观理论联系起来呢？ A. O. Caldeira 和 A. J. Leggett[11]给出一个详细方案. 如何表现环境呢？ Feynman 和 Vernon 用“谐振子浴”，Caldeira 和 Leggett 沿用这一方案. 环境是相当大量的谐振子，质量、频率和坐标是 $m_i, \omega_i, x_i(t)$；其中 $i=1, 2, \cdots, N$. 它们和体系(质量 M，坐标 $q(t)$)，在势场 $V(q)$ 和外力 $F_{ext}(t)$ 作用下相互作用. 相互作用是什么形式呢？ 要作假设. 有了这些就可以写出体系加环境这一复合体的 Hamilton

量.但最终要解决的是体系的量子性质,它和环境的 N 个振子是耦合在一起的.最好的方案是 Feynman 的路径积分:对环境振子的各种不同历史积分.这样余下的就是体系的有效 Hamilton 量,环境的影响作为有效相互作用留在其中.为了应用 Callan-Coleman 方法求隧穿率,Caldeira 和 Leggett 用虚时间积分.最后便可以用体系的有效 Hamilton 量求它的宏观量子性质了.

在实现这个纲领中有两个重要问题.第一,设定的体系加环境的 Hamilton 量是否可行?意思是在体系中有许多微观参数 m_i,ω_i,还有环境振子与体系的耦合常数 c_i,d_i 等.路径积分必须能够完成,得到体系有效 Hamilton 量.即使做到了,这些微观参数的归宿如何呢?它们必须以某种结合给出唯一的宏观参数,只有它才能最后出现在有效 Hamilton 量中.第二,Hamilton 量是否足够普遍.即使第一个问题解决得很好,结论也只是:这是一个模型.当然不排斥还有其他模型可以和它竞争.如果能解决第二个问题,即以谐振子浴代表环境,体系和环境复合体的 Hamilton 量的写法是唯一的,则这已不再是"一个模型",而是一个理论了.文献[11]很大篇幅是在论证第二个问题.

6.5.1 关于正则变换和绝热近似

这是为了以下内容作的方法上的准备.

考虑体系的 Lagrange 量:

$$\begin{aligned} L &= L_0 + \Delta L_1, \\ L_0 &= \frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2) - V(x,y), \\ \Delta L_1 &= \varepsilon \dot{x} y. \end{aligned} \tag{6.5.1}$$

ΔL_1 是与速度有关的耦合,ε 为常数.在 Lagrange 量上加一个时间函数的微商不会改变运动方程,原因是它对作用量的贡献只是一个常数.若用其他耦合项,即

$$\left.\begin{aligned} \Delta L_2 &= -\varepsilon x \dot{y}, \\ \Delta L_3 &= \frac{\varepsilon}{2}(\dot{x}y - x\dot{y}), \end{aligned}\right\} \tag{6.5.2}$$

则它们和 ΔL_1 是只相差一个时间函数的微商,因此会导致同样的运动方程.它们相应的 Hamilton 量是

$$\left.\begin{aligned} H_1 &= \frac{(p_x-\varepsilon y)^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + V(x,y), \\ H_2 &= \frac{p_x^2}{2m} + \frac{(p_y+\varepsilon x)^2}{2m} + V(x,y), \\ H_3 &= \frac{(p_x-\varepsilon y/2)^2}{2m} + \frac{(p_y+\varepsilon x/2)^2}{2m} + V(x,y). \end{aligned}\right\} \tag{6.5.3}$$

从 H 的形式可知这是一个粒子在势场 $V(x,y)$ 以及在 z 方向磁场下所作的运动.磁场的矢量势(电荷因子略去)是

$$\left.\begin{aligned} &A_x^{(1)} = -\varepsilon y, \quad A_y^{(1)} = A_z^{(1)} = 0; \\ &A_x^{(2)} = \varepsilon x, \quad A_y^{(2)} = A_z^{(2)} = 0; \\ &A_x^{(3)} = -\frac{\varepsilon}{2}y, \quad A_y^{(3)} = \frac{\varepsilon}{2}x, \quad A_z^{(3)} = 0. \end{aligned}\right\} \tag{6.5.4}$$

它们相当于不同的规范选择.考虑二维谐振子,在 z 轴方向有磁场:

$$H=\frac{p_x^2}{2m}+\frac{(p_y+\varepsilon x)^2}{2m}+\frac{1}{2}(m\omega_1^2x^2+m\omega_2^2y^2). \tag{6.5.5}$$

进行正则变换,生成函数为

$$F(y,z)=-m\omega_2yz, \tag{6.5.6}$$

它的作用是将坐标 y 换为 z,并有变换关系

$$p_y=\frac{\partial F}{\partial y}=-m\omega_2z,$$

$$p_z=-\frac{\partial F}{\partial z}=m\omega_2y,$$

即将旧动量 p_y 换为新坐标 z,将旧坐标 y 换成新动量 p_z:

$$H'=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_z^2)+\frac{1}{2}m\omega_1^2x^2+\frac{1}{2}m\left(\omega_2z-\frac{\varepsilon}{m}x\right)^2. \tag{6.5.7}$$

从耦合方式看,是从 p_yx 耦合式(6.5.5)变为 xz 耦合式(6.5.7).

在处理分子结构时,量子力学中常用的是 Born-Oppenheimer 近似[16].它的思路是将原子核(坐标 q,动量 p_q)作为慢运动,电子(坐标 ξ_i,动量 p_i,$i=1,2,\cdots,N$)作为快运动.在绝热近似下,可以视 q 为参数,它决定了电子感受到的势场.先解电子的 Schrödinger 方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2+V(q)\right]\chi_k(\xi_i,q)=U_k(q)\,\chi_k(\xi_i,q). \tag{6.5.8}$$

右方的 $U_k(q)$ 是本征值,q 作为参数出现.$\chi_k(\xi_i,q)$ 是电子波函数.电子能量本征值反过来确定核的运动,作为其本征方程的势能:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_q^2+U_k(q)\right]\varphi_{ik}(q)=E_i\varphi_{ik}(q). \tag{6.5.9}$$

这样,核的运动和电子运动就分离了,但它们仍是有耦合的.以 i,j 代表核波函数的状态,k,l 代表多电子波函数的状态,则分子系统的波函数是(以 $\{\xi\}$ 代表电子坐标的集合)

$$\psi_{ik}(q,\{\xi\})=\varphi_{ik}(q)\,\chi_k(\{\xi\},q). \tag{6.5.10}$$

绝热近似的成立条件是下列矩阵元可以被忽略:

$$\begin{aligned}\langle ik\mid\Delta\hat{H}\mid jl\rangle\equiv-\frac{\hbar^2}{2M}\int\mathrm{d}q\int\mathrm{d}\xi\Big\{&2\varphi_{ik}^*(q)\frac{\partial}{\partial q}\varphi_{jl}(q)\,\chi_k^*(\xi,q)\frac{\partial}{\partial q}\chi(\xi,q)\\&+\varphi_{ik}^*(q)\varphi_{jl}(q)\,\chi_k^*(\xi,q)\frac{\partial^2}{\partial q^2}\chi_l(\xi,q)\Big\}.\end{aligned} \tag{6.5.11}$$

在绝热近似条件下,核的运动和电子的运动都是保守的,它们之间没有能量交换.

6.5.2 有耗散的电磁体系的 Hamilton 量

先从一个简单的体系开始.这是一个超导环,环孔中有磁通 Φ 穿过.它的 Lagrange 量是

$$L=\frac{1}{2}C\dot{\Phi}^2-\frac{1}{2L}\Phi^2, \tag{6.5.12}$$

相应的运动方程是

$$C\ddot{\Phi}+\frac{\Phi}{L}=0. \tag{6.5.13}$$

“环境”就是处于正常态的电子，正常电流 I_n 是有耗散的. 相互作用 Lagrange 量是

$$\Delta L=\int \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3x, \tag{6.5.14}$$

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})=\sum_i e\boldsymbol{v}_i\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i),$$

$\boldsymbol{j}$ 是正常电子的电流密度算符，$\boldsymbol{v}$ 是电子速度，积分对环的体积进行. 令 $\boldsymbol{l}$ 为沿环的长度，方向与 $\boldsymbol{j}$ 一致，S 为环的截面积，则有 $\boldsymbol{j}\mathrm{d}^3x=S\boldsymbol{j}|\mathrm{d}\boldsymbol{l}|=I_n\mathrm{d}\boldsymbol{l}$，$I_n$ 是正常电流. 因此

$$\Delta L=I_n\oint\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l},$$

积分是沿环的封闭线积分. 用 Stokes 定理，得 $\Delta L=I_n\Phi$. 采用 Coulomb 规范 $\boldsymbol{E}=-\dot{\boldsymbol{A}}$，$I_n=jS=\sigma ES=-\sigma|\dot{\boldsymbol{A}}|S=-\sigma\frac{\dot{\Phi}}{l}S$，此处 σ 是电导率，l 是环总长. 因电阻是 $R_n=\left(\frac{\sigma S}{l}\right)^{-1}$，上式为 $I_n=-\frac{\dot{\Phi}}{R_n}$. 运动方程可以写为

$$C\ddot{\Phi}+\frac{\dot{\Phi}}{R_n}+\frac{\Phi}{L}=0. \tag{6.5.15}$$

我们的目的是把耗散项用电阻（造成耗散的“环境”）的微观坐标表示出来，写出体系-环境的微观 Lagrange 量，而它必须能导致仅包括一个宏观参量 R_n 的运动方程式(6.5.15). 这就能说明 Lagrange 量的选择是正确的，然后用它去进行量子效应的计算. 定义电荷量 $\mathcal{Q}_n$：

$$\mathcal{Q}_n(t)=\int_0^t I_n(t')\mathrm{d}t', \tag{6.5.16}$$

即

$$I_n(t)=\frac{\mathrm{d}\mathcal{Q}_n(t)}{\mathrm{d}t}. \tag{6.5.17}$$

$\mathcal{Q}_n$ 是正常电流流过时间 t 通过的电荷量. $\Delta L=\dot{\mathcal{Q}}_n\Phi$ 可以改写作

$$\Delta L=-\mathcal{Q}_n\dot{\Phi}, \tag{6.5.18}$$

它们相差一个函数的时间微商，因此完全等价. $\mathcal{Q}_n$ 和电阻有关，电阻可以看成是含有大量简正模的振子集合的效应，以 Q_α 代表简正坐标，α 为模式. $\mathcal{Q}_n$ 可以一般地写作

$$\mathcal{Q}_n=\sum_\alpha\tilde{c}_\alpha Q_\alpha. \tag{6.5.19}$$

再次用“相差一个时间微商”办法，有

$$\Delta L=\Phi\sum_\alpha\tilde{c}_\alpha\dot{Q}_\alpha. \tag{6.5.20}$$

环境作为质量 m_α、频率 ω_α 的振子 Q_α 的集合，也有自己的 Lagrange 量. 总体系的 Lagrange 量就是

$$L=\frac{1}{2}C\dot{\Phi}^2-\frac{1}{2L}\Phi^2+\Phi\sum_\alpha\tilde{c}_\alpha\dot{Q}_\alpha-\sum_\alpha\frac{1}{2}m_\alpha\omega_\alpha^2Q_\alpha^2+\sum_\alpha\frac{1}{2}m_\alpha\dot{Q}_\alpha^2. \tag{6.5.21}$$

式中等号右边的前两项是属体系的，后两项是属环境的，中间一项是体系、环境相互作用. Φ 和 Q_α 的共轭动量是

$$\left.\begin{aligned} P_\Phi &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\Phi}} = C\dot{\Phi}, \\ P_{Q_\alpha} &= \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_\alpha} = m_\alpha \dot{Q}_\alpha + \Phi \sum_\alpha \bar{c}_\alpha. \end{aligned}\right\} \tag{6.5.22}$$

由此,总体系的 Hamilton 量是

$$H = \frac{1}{2C}P_\Phi^2 + \frac{1}{2L}\Phi^2 + \sum_\alpha \left(\frac{1}{2m_\alpha}P_{Q_\alpha}^2 + \frac{1}{2}m_\alpha\omega_\alpha^2 Q_\alpha^2\right) - \Phi\sum_\alpha \frac{1}{m_\alpha}\bar{c}_\alpha P_{Q_\alpha} + \Phi^2 \sum_\alpha \frac{\bar{c}_\alpha^2}{2m_\alpha}. \tag{6.5.23}$$

回顾式(6.5.5)～式(6.5.7),是从动量-坐标耦合变到坐标-坐标耦合.此处也同样,用生成函数

$$F(x_\alpha, Q_\alpha) = \sum_\alpha m_\alpha \omega_\alpha Q_\alpha x_\alpha \tag{6.5.24}$$

能得到

$$\begin{aligned} P_{x_\alpha} &= - m_\alpha\omega_\alpha Q_\alpha, \\ P_{Q_\alpha} &= m_\alpha\omega_\alpha x_\alpha. \end{aligned} \tag{6.5.25}$$

用新坐标 x_α 和新动量 P_{x_α} 置换旧坐标 Q_α 和旧动量 P_{Q_α}:

$$H' = \frac{1}{2C}\dot{\Phi}^2 + \frac{1}{2L}\Phi^2 + \sum_\alpha \left(\frac{1}{2}m_\alpha\omega_\alpha^2 x_\alpha^2 + \frac{1}{2m_\alpha}P_{x_\alpha}^2\right) - \Phi\sum_\alpha \bar{c}_\alpha\omega_\alpha x_\alpha + \Phi^2 \sum_\alpha \frac{\bar{c}_\alpha^2}{2m_\alpha}. \tag{6.5.26}$$

令 $\bar{c}_\alpha\omega_\alpha = c_\alpha$,总体系的 Lagrange 量是

$$L' = \frac{1}{2}C\dot{\Phi}^2 - \frac{1}{2L}\Phi^2 + \sum_\alpha \left(\frac{1}{2}m_\alpha \dot{x}_\alpha^2 - \frac{1}{2}m_\alpha\omega_\alpha^2 x_\alpha^2\right) + \Phi\sum_\alpha c_\alpha x_\alpha - \Phi^2 \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{2m_\alpha\omega_\alpha^2}. \tag{6.5.27}$$

相互作用项显示环境坐标 x_α 以不同强度 c_α 耦合于体系坐标 Φ.上式最后一项是重正化项,它合并于 $-\frac{1}{2L}\Phi^2$,实际是改变了体系参数.在用微观 Lagrange 量进行计算时,相互作用项会带来体系参数的变化,而这一项恰恰起了抵消项的作用.如果物理上不应有变化,这一项就应保留.式(6.5.27)就是体系加环境微观 Lagrange 量的标准形式.取成坐标-坐标耦合是为了对环境坐标进行路径积分时的方便.

6.5.3 非绝热性的修正,耗散体系的微观 Lagrange 量

如果绝热近似的成立条件并不完全满足,式(6.5.11)就成为非绝热修正.将绝热近似用于有宏观量粒子的环境有一个特殊之处.波函数 $\chi_k(\{\xi\},q)$ 的 k 代表 N 个电子的状态.很多的由 $\Delta\hat{H}$(式(6.5.11))耦合的 k,l 态实际上只会在宏观量 N 的粒子中有 $1/N$ 量级的差别.因此在式(6.5.8)中的 U_k 实际上对 k 的依赖很弱,即作为决定宏观体系运动方程式(6.5.9)中的势实际上是与 k 无关的.这样体系的波函数就与微观环境的状态 k 无关了.式(6.5.9)变为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_q^2+U(q)\right]\varphi_i(q)=E_i\varphi_i(q), \tag{6.5.28}$$

而非绝热修正变为

$$\langle ik\mid\Delta\hat{H}\mid ij\rangle=-\frac{\hbar^2}{2M}\int dq\int d\xi\Big\{2\varphi_i^*(q)\frac{\partial}{\partial q}\varphi_j(q)\chi_k^*(\xi,q)\frac{\partial}{\partial q}\chi_l(\xi,q)$$
$$+\varphi_i^*(q)\varphi_j^*(q)\chi_k^*(\xi,q)\frac{\partial^2}{\partial q^2}\chi_l(\xi,q)\Big\}. \tag{6.5.29}$$

这种情况使得式(6.5.29)可以近一步简化.在环境波函数空间定义算符$\hat{K}$:

$$\hat{K}_{kl}(q)\equiv\langle k\mid\hat{K}(q)\mid l\rangle=\int\chi_k^*(\xi,q)\left(-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial q}\right)\chi_l(\xi,q)d\xi, \tag{6.5.30}$$

式(6.5.29)就变为

$$\langle ik\mid\Delta\hat{H}\mid jl\rangle=\frac{1}{2M}\langle i\mid p\,\hat{K}_{kl}(q)+\hat{K}_{kl}(q)p+(\hat{K}^2)_{kl}(q)\mid j\rangle, \tag{6.5.31}$$

此处有

$$\langle i\mid p\mid j\rangle=\int\varphi_i^*(q)\left(-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial q}\right)\varphi_j(q)dq. \tag{6.5.32}$$

总 Hamilton 量变为

$$\hat{H}=\frac{1}{2M}(p+\hat{K}(q))^2+U(q)+\hat{H}_{\mathrm{env}}, \tag{6.5.33}$$

$\hat{H}_{\mathrm{env}}$是环境 Hamilton 量,仅和ξ有关,$U(q)$是环境在绝热近似下导致对体系的有效势,而$\hat{K}(q)$是非绝热修正.作为环境波函数空间的算符,$\hat{K}(q)$应与$\hat{x}_j$,$\hat{p}_j$有关,此处x_j和p_j是环境简正模j的广义坐标与动量算符.环境的状态是$|n_1,n_2,\cdots,n_j,\cdots\rangle$,此处$n_j$代表简正模$j$态上的数子数.$\hat{x}_j$,$\hat{p}_j$的非零矩阵元是

$$\left.\begin{aligned}\langle n_j+1\mid\hat{x}_j\mid n_j\rangle&=\langle n_j\mid\hat{x}_j\mid n_j+1\rangle=(n_j+1)^{1/2}\left(\frac{\hbar}{2m_j\omega_j}\right)^{1/2},\\ \langle n_j+1\mid\hat{p}_j\mid n_j\rangle&=-\langle n_j\mid\hat{p}_j\mid n_j+1\rangle=\mathrm{i}m_j\omega_j(n_j+1)^{1/2}\left(\frac{\hbar}{2m_j\omega_j}\right)^{1/2}.\end{aligned}\right\} \tag{6.5.34}$$

假定$\hat{K}(q)$线性地依赖$\hat{x}_j$,$\hat{p}_j$.这个假定并不意味体系与环境相互作用是弱的.体系与环境的相互作用主要体现在绝热近似势$U(q)$,而$\hat{K}(q)$仅是它的非绝热修正.$\hat{K}$可以使任一个模式的粒子数变化1,但它同时可以使任何数量的模式改变粒子数.从式(6.5.33)看,为了保证$\hat{H}$对时间反演的不变性,$\hat{K}$的时间反演行为应和p相同.由于x_j与q在时间反演下不变,因此在线性假定下$\hat{K}(q)$的形式只能是

$$\hat{K}(q)=\sum_j K_j(q)\,\hat{p}_j. \tag{6.5.35}$$

总 Hamilton 量(式(6.5.33))变为

$$\hat{H}=\frac{1}{2M}(\hat{p}+\sum_j K_j(q)\,\hat{p}_j^2)+U(q)+\hat{H}_{\mathrm{env}}. \tag{6.5.36}$$

这里的体系-环境耦合是动量-动量方式,且同时系统坐标q也出现.为了得到坐标-坐标耦合,可以用6.5.2节的方法.第一步,引入新坐标y_j,生成函数是

$$F=\sum_j m_j\omega_j x_j y_j,\tag{6.5.37}$$

变换关系是

$$\left.\begin{aligned} p_j&=\frac{\partial F}{\partial x_j}=m_j\omega_j y_j,\\ p_{y_j}&=-\frac{\partial F}{\partial y_i}=-m_j\omega_j x_j.\end{aligned}\right\}\tag{6.5.38}$$

将式(6.5.38)代入$\hat{H}$(式(6.5.36))得到$\hat{H}'(q,p,y_i,p_{y_i})$,再回到 Lagrange 量,得

$$\begin{aligned} L'(q,\dot{q};\ y_j,\dot{y}_j)=&\frac{1}{2}m\dot{q}^2-U(q)+\sum_j\frac{1}{2}m_i\dot{y}_i^2-\sum_j\frac{1}{2}m_j\omega_j^2y_j^2\\ &-\sum_j m_j\omega_j K_j(q)\dot{q}y_j.\end{aligned}\tag{6.5.39}$$

在耦合项中已是速度-坐标耦合了.为了再把速度换为坐标,先用"差一个时间微商"办法把时间微商从 q 移到 y_j 上,然后再进行一次正则变换.先改写 $K_j(q)\dot{q}$:

$$K_j(q)\dot{q}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^q K_j(q')\mathrm{d}q',$$

耦合项就变为 $-\sum_j m_j\omega_j y_j\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^q K_j(q')\mathrm{d}q'$. 在式(6.5.39)上加一个时间微商项 $\sum_j m_j\omega_j\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[y_i\int_0^q K_j(q')\mathrm{d}q'\right]$ 就得到等价的新 Lagrange 量:

$$\begin{aligned} L''=&\frac{1}{2}m\dot{q}^2-U(q)+\sum_j\frac{1}{2}m_jy_j^2-\sum_j\frac{1}{2}m_j\omega_j^2y_j^2\\ &+\sum_j m_j\omega_j\dot{y}_j\int_0^q K_j(q')\mathrm{d}q'.\end{aligned}\tag{6.5.40}$$

现在时间微商已移到 y_j 上了.先写出 Hamilton 量,然后作正则变换:

$$H''=\frac{p^2}{2M}+U(q)+\sum_j\left[\frac{1}{2m}\left(p_{y_j}-\frac{F_j(q)}{\omega_j}\right)^2_{\mathrm{sym}}+\frac{1}{2}m_j\omega_jy_j^2\right],\tag{6.5.41}$$

此处

$$F_j(q)=m_j\omega_j^2\int_0^q K_j(q')\mathrm{d}q'.\tag{6.5.42}$$

正则变换的生成函数和变换关系是

$$F'=\sum_j m_j\omega_j z_j y_j,\tag{6.5.43}$$

$$\left.\begin{aligned} p_{y_j}&=\frac{\partial F'}{\partial y_j}=m_j\omega_j z_j,\\ p_{z_j}&=-\frac{\partial F'}{\partial z_j}=-m_j\omega_j y_j.\end{aligned}\right\}\tag{6.5.44}$$

变换后的 Hamilton 量和相应的 Lagrange 量分别是

$$H'''=\frac{p^2}{2M}+U(q)+\sum_j\left[\frac{1}{2m_j}p_{z_j}^2+\frac{1}{2}m_j\omega_j^2\left(z_j-\frac{F_j(q)}{m_j\omega_j^2}\right)^2\right],\tag{6.5.45}$$

$$\begin{aligned} L'''=&\frac{1}{2}m\dot{q}^2-U(q)+\sum_j\left(\frac{1}{2}m_j\dot{z}_j^2-\frac{1}{2}m_j\omega_j^2z_j^2\right)\\ &+\sum_j F_j(q)z_j-\sum_j\frac{F_j^2(q)}{2m_j\omega_j^2}.\end{aligned}\tag{6.5.46}$$

将外力 $F_{\mathrm{ext}}(t)$包括进来,并将 z 改为 x,U 改为 V,就得到最后的标准形式:

$$L=\frac{1}{2}m\dot{q}^2-V(q)+\sum_j\left(\frac{1}{2}m_j\dot{x}_j^2-\frac{1}{2}m_j\omega_j^2x_j^2\right)+\sum_jF_j(q)x_j$$
$$-\sum_j\frac{F_j^2(q)}{2m_j\omega_j^2}+qF_{\text{ext}}(t). \tag{6.5.47}$$

有耗散的电磁体系的 Lagrange 量式(6.5.27)是此式的一个特例. 进一步对 $F_j(q)$ 作线性依赖假定[①]

$$F_j(q)=C_jq, \tag{6.5.48}$$

耦合项变为 $q\sum_jC_jx_j$,重正化项变为

$$-\sum_j\frac{C_j^2}{2m_j\omega_j}q^2\equiv\frac{1}{2}M(\Delta\omega)^2q^2. \tag{6.5.49}$$

Lagrange 量式(6.5.47)的运动方程是

$$\left.\begin{aligned}M\ddot{q}&=-\frac{\partial V}{\partial q}+M(\Delta\omega)^2q+F_{\text{ext}}(t)-\sum_jC_jx_j,\\ m_j\ddot{x}_j&=-m_j\omega_j^2x_j-C_jq.\end{aligned}\right\} \tag{6.5.50}$$

进行 Fourier 变换到$\tilde{q}(\omega)$和$\tilde{x}_j(\omega)$,并从两个运动方程消去$\tilde{x}_j$,得到系统的运动方程

$$-M\omega^2\,\tilde{q}(\omega)=-\left(\frac{\partial V}{\partial q}\right)(\omega)+\widetilde{F}_{\text{ext}}(\omega)+K(\omega)\,\tilde{q}(\omega), \tag{6.5.51}$$

此处

$$K(\omega)=\sum_j\frac{C_j^2}{m_j^2(\omega_j^2-\omega^2)}, \tag{6.5.52}$$

频率重正化$(\Delta\omega)^2$ 已包括在 V 中,成为重正化势.

6.5.4　微观参量与宏观耗散参量的关系

体系的宏观运动方程是

$$M\ddot{q}+\eta\dot{q}+\frac{\partial V}{\partial q}=F_{\text{ext}},$$

它的 Fourier 变换形式是

$$-M\omega^2\,\tilde{q}(\omega)-\mathrm{i}\omega\eta\,\tilde{q}(\omega)+\left(\frac{\partial V}{\partial q}\right)(\omega)=\widetilde{F}_{\text{ext}}(\omega). \tag{6.5.53}$$

将它与式(6.5.51)比较,得

$$K(\omega)=\mathrm{i}\omega\eta. \tag{6.5.54}$$

在将它与式(6.5.52)右方等同起来以前,先要处理式(6.5.52)在 ω_j 处的极点. 在对 ω_j 积分时绕过极点的方式是

$$\frac{1}{\omega_j^2-\omega^2}=\frac{1}{(\omega_j+\omega)(\omega_j-\omega-\mathrm{i}\varepsilon)},$$

即

$$\mathrm{Im}\,\frac{1}{\omega_j^2-\omega^2}=\frac{\pi}{2\omega_j}\delta(\omega_j-\omega).$$

式(6.5.52)给出

---

① 此假定在下文中将会放松.

$$\left.\begin{aligned}\operatorname{Im}K(\omega) &= \frac{\pi}{2}\sum_j \frac{C_j^2}{m_j\omega_j}\delta(\omega_j-\omega) \equiv J(\omega),\\ \operatorname{Re}K(\omega) &= 0.\end{aligned}\right\} \tag{6.5.55}$$

式(6.5.54)给出条件

$$J(\omega) = \eta\omega. \tag{6.5.56}$$

由于宏观运动方程在频率 ω_c 失效①,因此上式应用范围也是 $\omega<\omega_c$. 若 $F_j(q)$ 对 q 并非严格线性依赖,可将式(6.5.55)修改为

$$\frac{\pi}{2}\sum_j \frac{1}{m_j\omega_j^2}\left(\frac{\partial F_j}{\partial q}\right)^2\delta(\omega-\omega_j) = \eta(q). \tag{6.5.57}$$

至此,已证明了体系-环境总系统的微观 Lagrange 量式(6.5.47)能正确给出体系所满足的宏观运动方程,因此可以被接受为进行量子力学计算的出发点.

Caldeira 和 Leggett[11]致力于阐明 Lagrange 量式(6.5.47)是足够普遍的. 论证中有的步骤还不算是严格证明,只是"合理的论据".

除 Caldeira-Leggett 方法以外,处理超导隧穿结耗散问题的还有 V. Ambegaokar, V. Eckern 和 G. Schön 的方法[17,18]. 他们从超导结的微观模型出发,以准粒子自由度作为耗散及噪声源. 对于在谐振子势场以及常数外力场中的耗散体系,孙昌璞和余立华[19,20,21]用 Laplace 变换将特定的体系和环境坐标的 Heisenberg 算符 $q(t)$ 及 $x_j(t)$ 用初始条件表示,从而可以对体系作较深入的研究.

6.5.5 耗散与宏观量子隧穿

在无外力情况下对应 Lagrange 量(式(6.5.47)和式(6.5.48))的 Hamilton 量是

$$H = \frac{p^2}{2M} + V(q) + \sum_j\left(\frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2}m_i\omega_i^2x_i^2\right) - q\sum_i C_ix_i + q^2\sum_i\frac{C_i^2}{2m_i}\omega_i^2. \tag{6.5.58}$$

先作一个定性讨论[8]. 在多维空间(x_i,q)中势能曲面的等高线示于图 6.13,体系的势能$V(q)$示于图 6.12. $q>q_0$ 是势能为负的区域,在图 6.13 中以斜线画出并标记为 S. 图 6.12 中的 $q_{\max}$ 给出 $V(q)$ 的极大值 V_0. 图 6.13(a)中的$(q_{\max},x_i=0)$是势能曲面的鞍点,它对系统的势能是极大值,而对环境的势能是极小值. 隧穿的经典轨道相应于从原点$(q=0,x_i=0)$沿 q 轴经鞍点到达 S. 在有耗散时(图 6.13(b)),势能变为(只列一个环境坐标)

$$\begin{aligned}&V(q) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 - Cqx + q^2\frac{C^2}{2m\omega^2}\\ &= V(q) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x - \frac{C}{m\omega}q\right)^2,\end{aligned}$$

鞍点位置由$(q_{\max},0)$变为$\left(q_{\max},\dfrac{C}{m\omega}q_{\max}\right)$,在此点的势能仍为 $V(q_{\max})$(见图 6.13(b)),此时路径上势能虽然

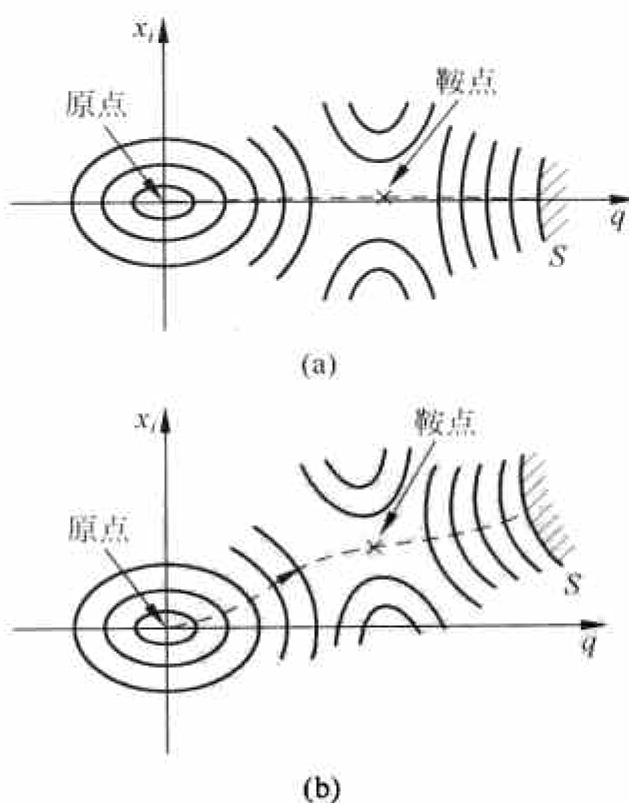


图 6.13 多维空间(x_i,q)中势能等高线
(a) 无耗散情况;(b) 有耗散情况

① $J(\omega)$不能无限随 ω 增长,宏观运动方程适用的上限是 ω_c.

未变，但路径变长，WKB 指数为 $\int (V(q,x_i))^{1/2}\mathrm{d}s$ 成正比，因此耗散使隧穿率变小.

在定量讨论中[11]需要计算体系在温度 $T(\beta=1/kT)$ 下的密度矩阵[①]

$$\rho(q_i\{x_i\},q_f\{x_f\};\beta)=\sum_n \mathrm{e}^{-\beta E_n}\psi_n^*(q_i\{x_i\})\psi_n(q_f,\{x_f\}),\tag{6.5.59}$$

此处 i，f 代表始末态. 在将 ρ 写成路径积分后需要对环境坐标的所有可能的"历史"积分. 环境坐标的历史是谐振子的周期运动，故有 $\{x_i\}=\{x_f\}\equiv\{\bar{x}\}$，而 $\bar{x}$ 可以取任何值，对所有历史求和就包括对 $\bar{x}_\alpha$（α 是模式指标）的积分. 约化密度矩阵因此可以写作

$$\rho(q_i,q_f;\beta)=\int\prod_\alpha \mathrm{d}\,\bar{x}_\alpha\int_{q(0)=q_i}^{q(\beta)=\beta_f}[Dq(\tau)]\int_{x_\alpha(0)=\bar{x}_\alpha}^{x_\alpha(\beta)=\bar{x}_\alpha}[Dx_\alpha(\tau)]$$
$$\times\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_0^\beta L_{\mathrm{E}}(q,\dot{q};\{x_\alpha,\dot{x}_\alpha\})\mathrm{d}\tau\right],\tag{6.5.60}$$

此处 L_{E} 是欧氏 Lagrange 量，$L_{\mathrm{E}}=T+V$：

$$L_{\mathrm{E}}(Q,\dot{q}\{x_\alpha,\dot{x}_\alpha\})=\frac{1}{2}M\dot{q}^2+V(q)+\frac{1}{2}\sum_\alpha m_\alpha(\dot{x}_\alpha^2+\omega^2\alpha x_\alpha^2)$$
$$+q\sum_\alpha C_\alpha x_\alpha+\frac{1}{2}M\mid\Delta\omega\mid^2q^2.\tag{6.5.61}$$

对 $[Dx_\alpha(\tau)]$ 的 Gauss 积分，正是本书第 5 章所计算的式(5.3.49)：

$$\int\mathrm{d}\,\bar{x}_\alpha\int_{x_\alpha(0)=\bar{x}_\alpha}^{x_\alpha(\beta)=\bar{x}_\alpha}[DX_\alpha(\tau)]\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_0^\beta\left[\frac{1}{2}m(\dot{x}_\alpha^2+\omega^2x_\alpha^2)+x_\alpha Cq(\tau)\right]\mathrm{d}\tau\right\}$$
$$=I(0)\exp\left\{\frac{C^2}{4m\,\hbar\omega}\int_0^\beta\mathrm{d}\tau\int_0^\beta\mathrm{d}\tau'\,\frac{q(\tau)q(\tau')\cosh\omega\left(\mid\tau-\tau'\mid-\frac{\beta}{2}\right)}{\sinh\omega\beta/2}\right\},\tag{6.5.62}$$

此处 $I(0)$ 是在 $C=0$ 时积分的值，它正是自由谐振子密度矩阵 $\rho_{\mathrm{osc}}(\bar{x},\bar{x};\beta)$ 对 $\bar{x}$ 的积分：

$$I(0)=\int\mathrm{d}\,\bar{x}\int_{x(0)=\bar{x}}^{x(\beta)=\bar{x}}[Dx(\tau)]\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_0^\beta\frac{1}{2}(m\,\dot{x}^2+\omega^2x^2)\mathrm{d}\tau\right]$$
$$\equiv\int\mathrm{d}\,\bar{x}\rho_{\mathrm{osc}}(\bar{x},\bar{x};\beta).\tag{6.5.63}$$

谐振子密度矩阵可以由式(5.3.26)[②]，式(5.3.30)和式(5.3.33)给出. 由于作用量是

$$S_0=\frac{m\omega}{\cosh\frac{\hbar\omega\beta}{2}}\bar{x}^2,$$

则有

$$\rho_{\mathrm{osc}}(\bar{x},\bar{x};\beta)=\exp\left(-\frac{S_0}{\hbar}\right)F(\beta)=\left(\frac{m\omega}{2\,\hbar\pi\sinh(\hbar\omega\beta)}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar\cosh\frac{\hbar\omega\beta}{2}}\bar{x}^2\right].$$

由此可得

$$I(0)=\int_{-\infty}^\infty\mathrm{d}\,\bar{x}\rho(\bar{x},\bar{x};\beta)=\frac{1}{2}\mathrm{csch}\,\frac{\hbar\omega\beta}{2}.\tag{6.5.64}$$

---

① 请参阅本书 5.3 节.

② 令 $x=x'=\bar{x}$.

式(6.5.62)中指数上的积分可以进一步变换.将 $q(\tau')$ 扩到域 $0\leqslant\tau'<\beta$ 之外,定义是 $q(\tau'+\beta)=q(\tau')$①,因此式(6.5.62)可以写作

$$\frac{1}{2}\operatorname{csch}\frac{\hbar\omega\beta}{2}\exp\left\{\frac{C^2}{4m\,\hbar\omega}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\tau'\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\mathrm{e}^{-\omega|\tau-\tau'|}q(\tau)q(\tau')\right\},\tag{6.5.65}$$

将它代回式(6.5.60),得到

$$\rho(q_i,q_f;\beta)=\rho_0(\beta)\int_{q(0)=q_i}^{q(\beta)=q_f}[Dq(\tau)]\exp\left\{\int_0^{\beta}\left[\frac{1}{2}M\dot{q}^2+V(q)\right]\mathrm{d}\tau\right\}\exp\{\Lambda[q(\tau)]/\hbar\},$$

此处

$$\rho_0(\beta)=\prod_{\alpha}\frac{1}{2}\operatorname{csch}\frac{\hbar\omega_\alpha\beta}{2}$$

是环境自由谐振子的约化密度矩阵,

$$\Lambda[q(\tau)]=\int_0^{\beta}\frac{1}{2}M(\Delta\omega)^2q^2(\tau)\mathrm{d}\tau+\sum_{\alpha}\left\{\frac{C_\alpha^2}{4m_\alpha\omega_\alpha}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\tau'\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\mathrm{e}^{-\omega_\alpha|\tau-\tau'|}q(\tau)q(\tau')\right\}\tag{6.5.66}$$

是系统与环境相互作用的影响,它的形式可以进一步简化.将恒等式

$$q(\tau)q(\tau')\equiv\frac{1}{2}\{q^2(\tau)+q^2(\tau')-(q(\tau)-q(\tau'))^2\}$$

代入式(6.5.66)并将 $q^2(\tau)$ 和 $q^2(\tau')$ 对 τ 和 τ' 积分,从式(6.5.49)可知它们的结果正好和式(6.5.66)第一项相抵消.因此,

$$\Lambda[q(\tau)]=-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\tau'\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\alpha(\tau-\tau')\{q(\tau)-q(\tau')\}^2,\tag{6.5.67}$$

此处

$$\begin{aligned}\alpha(\tau-\tau')&=\sum_{\alpha}\frac{C_\alpha^2}{4m_\alpha\omega_\alpha}\mathrm{e}^{-\omega_\alpha|\tau-\tau'|}\\&=\frac{1}{2\pi}\int_0^{\infty}J(\omega)\mathrm{e}^{-\omega|\tau-\tau'|}\mathrm{d}\omega\geqslant 0,\end{aligned}\tag{6.5.68}$$

谱密度 $J(\omega)$ 是由式(6.5.55)定义的,如果采用条件(式(6.5.56)) $J=\eta\omega$,则有

$$\alpha(\tau-\tau')=\frac{\eta}{2\pi}\frac{1}{(\tau-\tau')^2}.\tag{6.5.69}$$

它可以在条件 $|\tau-\tau'|\gtrsim\omega_c^{-1}$ 下成立.约化密度最后的形式是

$$\rho(q_i,q_f;\beta)=\int_{q_i}^{q_f}[Dq(\tau)]\exp\left(-\frac{1}{\hbar}S_{\mathrm{eff}}[q(\tau)]\right),\tag{6.5.70}$$

系统的有效作用量 S_{eff} 是

$$S_{\mathrm{eff}}[q(\tau)]=\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\left\{\frac{1}{2}M\dot{q}^2+V(q)\right\}+\frac{1}{2}\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau\int_0^{\beta}\mathrm{d}\tau'\alpha(\tau-\tau')\{q(\tau)-q(\tau')\}^2.\tag{6.5.71}$$

实际上在 $|\tau-\tau'|$ 很小时,$\alpha(\tau-\tau')$ 对式(6.5.71)的贡献是很小的.约化密度矩阵给出体系的所有平衡态性质.至此,已经可以按 Callan-Coleman 方法②进行量子隧穿率的计算.为了演

---

① 这就可以将对 τ' 的积分上下限延至 $-\infty$ 到 $+\infty$,因为只要 τ 限制在 $0\leqslant\tau<\beta$ 中,τ' 超过这个界限时,下式的被积分函数 $\mathrm{e}^{-\omega|\tau-\tau'|}$ 以指数趋零.

② 请参阅本书 5.4 节.

示式(6.5.71)的正确性,文献[11]附录B将它用于$V=\frac{1}{2}M\omega_0^2q^2$的情况,即系统是阻尼谐振子,所得结果和阻尼谐振子的密度矩阵的精确解完全一致.有效作用量式(6.5.71)给出的运动方程是

$$M\ddot{q}=\frac{\partial V}{\partial q}+\frac{\eta}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\tau'\frac{q(\tau)-q(\tau')}{(\tau-\tau')^2}. \tag{6.5.72}$$

右方第二项是环境作用于系统的有效力,积分在$\tau'=\tau$处定义为取主值,方程的解就是经典轨道.令$V(q)$在$q=0$处有一个极小值,在$q_{\max}$处有一个极大值,然后在q_0处降为0,$q>q_0$时V为负.这种位势使系统在$q=0$处有一个亚稳态,它会隧穿势垒则q_0,不再回来.
将经典轨道代入式(6.5.71)得到经典作用量B

$$B=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\tau\left\{\frac{1}{2}M\dot{q}^2+V(q)\right\}+\frac{\eta}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\tau\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\tau'\left(\frac{q(\tau)-q(\tau')}{(\tau-\tau')^2}\right)^2, \tag{6.5.73}$$

隧穿率Γ是

$$\Gamma=A\exp\left(-\frac{B}{\hbar}\right), \tag{6.5.74}$$

式(6.5.73)中的被积分函数的q就是回弹解.回弹解作用量是决定衰变率的主要因素.前置因子A是偏离经典轨道的各种轨道的贡献.参照式(5.2.21),有

$$A=\left(\frac{B^*}{2\pi\hbar}\right)^{1/2}\left|\frac{\det\hat{\mathscr{D}}_0}{\det'\hat{\mathscr{D}}_1}\right|^{1/2}, \tag{6.5.75}$$

其中算符$\hat{\mathscr{D}}_0$和$\hat{\mathscr{D}}_1$分别定义为

$$\hat{\mathscr{D}}_0q(\tau)\equiv\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+\omega_0^2\right)q(\tau)+\frac{\eta}{\pi M}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{q(\tau)-q(\tau')}{(\tau-\tau')^2}\mathrm{d}\tau', \tag{6.5.76}$$

$$\hat{\mathscr{D}}_1q(\tau)\equiv\left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}+\frac{1}{M}V''[q_{\mathrm{cl}}(\tau)]\right)q(\tau)+\frac{\eta}{\pi M}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{q(\tau)-q(\tau')}{(\tau-\tau')^2}\mathrm{d}\tau'. \tag{6.5.77}$$

$q_{\mathrm{cl}}(\tau)$是运动方程式(6.5.72)的回弹解.式(6.5.75)中的B^*是①

$$B^*=\int_{-\infty}^{\infty}M\dot{q}_{\mathrm{cl}}^2\mathrm{d}\tau. \tag{6.5.78}$$

式(6.5.75)中的det′意为弃去零本征值.

对于一般情况,可以从对作用量式(6.5.74)变分得到的Euler-Lagrange方程(即式(6.5.72))求数值解,代回式(6.5.74)求得回弹解作用量.但为了尽可能得到具体的解析表达式,仍对"二次加三次势"求解析解.在有耗散情况下,只有在极限情况下,即弱阻尼$\alpha=\frac{\eta}{2M\omega}\to0$和强阻尼$\alpha\to\infty$获得解析解.此处仅将文献[11]结果列出.无耗散时,"二次加三次势"回弹解作用量是$B_0=\frac{36V_0}{5\omega_0}$(式(5.A.2))隧穿率是$\Gamma=\sqrt{60}\omega_0\left(\frac{B_0}{2\pi\hbar}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-B_0/\hbar}$(式(5.A.31)).耗散的主要作用是增加回弹解作用量

$$B=B_0+\Delta B, \tag{6.5.79}$$

其中

$$\Delta B=\Phi(\alpha)\eta q_0^2=\Phi(\alpha)2M\omega_0\alpha q_0^2. \tag{6.5.80}$$

---

① B^*的来源是处理零模解时出现的经典解作用量S_0.经典解是零能量解(式(5.2.6)),故S_0就是动能对τ积分的2倍.

Φ 是依赖于 α 的数量级为 $O(1)$ 的量. 对弱阻尼情况, $\Phi=12\zeta(3)/\pi^3\approx0.47$; 对强阻尼情况, $\Phi=2\pi/9\approx0.70$. 耗散的另一个影响是改变前置因子. 一般的分析表明前置因子对 α 的依赖较强, 但它对隧穿率的影响远不如在指数上的经典解作用量. 在式(6.5.80)中的 q_0^2 值根据式(5.A.1)定义的参数关系可以写作

$$q_0^2=\frac{27V_0}{2M\omega_0^2}. \tag{6.5.81}$$

将它代入式(6.5.80), 最终得到

$$\Gamma(\alpha)=f(\alpha)\omega\left(\frac{60V_0}{\hbar\omega_0}\right)^{1/2}\left(\frac{18}{5\pi}\right)^{1/2}\exp\left\{-\frac{36}{5}\frac{V_0}{\hbar\omega_0}\left(1+\frac{15}{4}\Phi\alpha\right)\right\}, \tag{6.5.82}$$

其中 $f(\alpha)$ 是耗散带来的对前置因子的修正. 由于 $\Delta B>0$, 耗散永远压低隧穿率, 这是瞬子方法的必然结论. 瞬子方法的性质是半经典近似, 但是非微扰的. 在瞬子方法不能应用时(例如对浅双阱势能级的量子效应重要的情况下), 会出现耗散促进隧穿的情况[22].

6.5.6 耗散与宏观量子相干

耗散对宏观量子相干的影响比它对隧穿的影响要复杂得多, 对它的了解也还很不够. 下面只据文献[10]作半定量讨论①. 考虑图 6.8 所示的双阱势, 双阱加环境势的等高线示于图 6.14. 仍只考虑二能级问题, 即在势垒很高时, 左右阱各有一个束缚态 ψ_L 及 ψ_R, 它们的能量是简并的. 在势垒有限时存在隧穿劈裂. 左右阱态的偶组合是基态, 奇组合是激发态. 二能级问题用 Pauli 矩阵描述是很简洁的. 在 σ_z 为对角的表示中, 令 $\sigma_z=+1(-1)$ 相应系统位于右阱 $+q_0$ (左阱 $-q_0$), 即以 σ_z 的本征态代表 ψ_R 和 ψ_L, 体系的 Hamilton 量可以写作

$$H_s=-\frac{\hbar\Gamma}{2}\sigma_x. \tag{6.5.83}$$

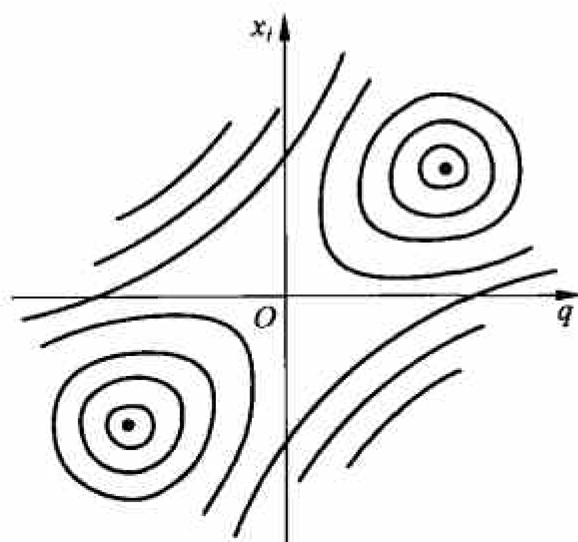


图 6.14 多维空间 (q,x_i) 中的环境加双阱势等高线

它导致 ψ_R 和 ψ_L 相互转变, 常称为跳跃项(hopping term). H_s 的本征矢和相应的本征值是

$$\left.\begin{aligned}\psi_0&=\frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{1}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_R+\psi_L),\quad \varepsilon_0=-\frac{\hbar\Gamma}{2};\\ \psi_e&=\frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_R-\psi_L),\quad \varepsilon_e=-\frac{\hbar\Gamma}{2};\end{aligned}\right\} \tag{6.5.84}$$

能量劈裂是 $\hbar\Gamma$. 据式(6.5.58), 系统-环境总 Hamilton 量是

$$H=-\frac{\hbar\Gamma}{2}\sigma_x-q_0\sigma_z\sum_i C_ix_i+\frac{1}{2}\sum_i\left(\frac{p_i^2}{2m_i}+m_i\omega_i^2x_i^2\right)+q_0^2\sum_i\frac{C_i^2}{2m_i\omega_i^2}. \tag{6.5.85}$$

在相互作用项中 $-q\sum_i C_ix_i$ 已改写为 $-q_0\sigma_z\sum_i C_ix_i$, 因为系统处于右、左阱时, 相互作用能分别是 $-q_0\sum_i C_ix_i$ 和 $q_0\sum_i C_ix_i$, 刚好用 σ_z 的本征值表示. 在 6.4 节中表明, 相干劈裂 Γ 正

① 文献[12]给出更详尽的讨论.

是共振频率(系统在左、右阱内往复的频率). 环境中振子频率 $\omega_i \gg \Gamma$,系统-环境可以适用绝热近似. 它们的波函数是

$$\psi(\sigma_z, \{x_i\}, t) \approx \sum_{\alpha=\pm 1} C_\alpha(t)\, \chi_\alpha(\sigma_z) \prod_i \psi_\alpha^0(x_i), \tag{6.5.86}$$

此处$\chi_\alpha(\alpha=+1,-1)$是 σ_z 的本征态(R,L). 记式(6.5.85)后三项之和为 $\sum_i h_i$, 此处 h_i 即是

$$h_i = -q_0\alpha C_i x_i + \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m_i\omega_i^2 x_i^2 \tag{6.5.87a}$$

$$= \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m_i\omega_i^2\left(x_i - \frac{\alpha C_i q_0}{m_i\omega_i^2}\right)^2 + \text{const.} \tag{6.5.87b}$$

h_i 的本征态记作 $\psi_\alpha^0(x_i)$. h_i 作用于 ψ_R, ψ_L 时 σ_z 可用本征值 $\alpha=+1,-1$ 代替. 式(6.5.87b)前二项正是平衡位置在$\frac{\alpha C_i q_0}{m_i\omega_i^2}$的谐振子 Hamilton 量. 记谐振子波函数为 $\psi_0(x)$,就有

$$\psi_\alpha^0(x_i) = \psi_0\left(x_i - \frac{\alpha C_i q_0}{m_i\omega_i^2}\right). \tag{6.5.88}$$

当系统位于左阱时,体系总波函数是 $\chi_{-1}\prod_i \psi_{-1}^0(x_i)$, 当它位于右阱时,总波函数是 $\chi_{+1}\prod_i \psi_{+1}^0(x_i)$. 考虑了环境之后共振频率就是

$$\widetilde{\Gamma} = \Gamma\langle \chi_+ \prod_i \psi_{+1}^0(x_i) \mid \sigma_x \mid \chi_- \prod_i \psi_{-1}^0(x_i)\rangle$$

$$\Gamma = \prod_i (\psi_{+1}^0(x_i), \psi_{-1}^0(x_i)). \tag{6.5.89}$$

简单的积分给出①

$$\widetilde{\Gamma} = \Gamma\exp\left[-\sum_i \frac{C_i^2 q_0^2}{\hbar m_i\omega_i^3}\right]. \tag{6.5.90}$$

式(6.5.90)表明,环境的影响使隧穿率下降. 从图 6.14 也可看出,由于耦合,阱底位置从无阻尼情况的 q 轴上$\pm q_0$ 处在 x 方向移动,方向取决于 q_0 的符号. 这增加了隧穿难度. 考虑式(6.5.90)右方的指数函数,它与谱密度 $J(\omega)$有关,因为用式(6.5.49)可以给出以下积分:

$$\int \frac{J(\omega)}{\omega^2}\mathrm{d}\omega = \frac{\pi}{2}\sum_i \int \frac{C_i^2}{m_i\omega_i\omega^2}\delta(\omega_i - \omega)\mathrm{d}\omega = \frac{\pi}{2}\sum_i \frac{C_i^2}{m_i\omega_i^3}.$$

因此

$$\exp\left[-\frac{q_0^2}{\hbar}\sum_i \frac{C_i^2}{m_i\omega_i^3}\right] = \exp\left[-\frac{2q_0^2}{\pi\hbar}\int \frac{J(\omega)}{\omega^2}\mathrm{d}\omega\right].$$

积分上限是切断频率 $\bar{\omega}$,下限是 ω_Γ,即绝热近似适用的界限. 式(6.5.90)给出

$$\widetilde{\Gamma} = \Gamma\exp\left[-\frac{2q_0^2}{\pi\hbar}\int_{\omega_\Gamma}^{\bar{\omega}} \frac{J(\omega)}{\omega^2}\mathrm{d}\omega\right]. \tag{6.5.91}$$

当 $J=\eta\omega$ 时,有

---

① 由于 $\psi^0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\exp(-m\omega x^2/2\hbar)$, $(\psi_{+1}^0(x_i), \psi_{-1}^0(x_i)) = \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{C_i q_0^2}{\hbar m_i\omega_i^3}\right)\times \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) = \exp\left(-\frac{C_i^2 q_0^2}{\hbar m_i\omega_i^3}\right)$.

$$\widetilde{\Gamma}=\Gamma\left(\frac{\omega_\Gamma}{\bar{\omega}}\right)^{\eta/\eta_c}=\bar{\omega}\left(\frac{\Gamma}{\bar{\omega}}\right)\left(\frac{\omega_\Gamma}{\bar{\omega}}\right)^{\eta/\eta_c}, \tag{6.5.92}$$

此处

$$\eta_c=\frac{\pi\hbar}{2q_0^2}.$$

以上讨论使人不够满意之处是，对 ω 积分取了下限 ω_Γ. 那么环境振子中频率更低的成分对宏观量子相干产生什么影响呢？选 $\omega_\Gamma=\Gamma$（频率低于 Γ 的振子跟不上体系的"慢变化"）. 式(6.5.92)给出

$$\widetilde{\Gamma}=\bar{\omega}\frac{\Gamma}{\bar{\omega}}\left(\frac{\Gamma}{\bar{\omega}}\right)^{\eta/\eta_c}=\bar{\omega}\left(\frac{\Gamma}{\bar{\omega}}\right)^{1+\eta/\eta_c}. \tag{6.5.93}$$

这个结论令人鼓舞：真实的频率 $\widetilde{\Gamma}=\Gamma\left(\frac{\Gamma}{\bar{\omega}}\right)^{\eta/\eta_c}<\Gamma$. 为什么不更进一步，选下限为 $\widetilde{\Gamma}$（只要 $\omega_i\gg\widetilde{\Gamma}$，绝热近似就可用）：

$$\begin{aligned}\widetilde{\Gamma}'&=\bar{\omega}\frac{\Gamma}{\bar{\omega}}\left(\frac{\widetilde{\Gamma}}{\bar{\omega}}\right)^{\eta/\eta_c}=\bar{\omega}\frac{\Gamma}{\bar{\omega}}\left[\left(\frac{\Gamma}{\bar{\omega}}\right)^{1+\eta/\eta_c}\right]^{\eta/\eta_c}\\&=\bar{\omega}\left(\frac{\Gamma}{\bar{\omega}}\right)^{1+\frac{\eta}{\eta_c}+\left(\frac{\eta}{\eta_c}\right)^2}.\end{aligned}$$

频率再次下降. 继续下去有两种可能：

$$\left.\begin{aligned}&\widetilde{\Gamma}=\bar{\omega}\left(\frac{\Gamma}{\bar{\omega}}\right)^{\frac{1}{1-\eta/\eta_c}}, &&\eta<\eta_c;\\&\widetilde{\Gamma}=0, &&\eta>\eta_c.\end{aligned}\right\} \tag{6.5.94}$$

这种类似重正化群的论证最后得到有趣的结论. 如果阻尼常数 η 低于临界值 η_c，则隧穿率（共振频率）减小，如果 η 大于 η_c，则体系稳坐在一个阱中，隧穿率为 0.

6.6 有关 Josephson 结的宏观量子隧穿实验

1981 年发表的两项实验工作[23,24]都是用流偏置 Josephson 结. 式(6.2.18)给出势能

$$V(\phi)=-\frac{\Phi_0}{2\pi}(I_c\cos\phi+I_{ext}\phi). \tag{6.6.1}$$

当 $I_{ext}/I_c\equiv x<1$ 时，$V(\phi)$ 有一系列最小值（阱）$\sin\phi_{min}=x$，其间是势垒. 自阱中亚稳态（零点能 $\hbar\omega_0/2$）到垒顶能量差为

$$H(x)=\frac{I_c\Phi_0}{\pi}\left[(1-x^2)^{1/2}-x\cos^{-1}x\right]-\frac{\hbar\omega_0}{2}, \tag{6.6.2}$$

I 愈接近临界值时垒愈低. 温度足够高时，亚稳态跃出势垒，主要由热激发造成，跃迁率为

$$\tau_{th}^{-1}=\frac{\omega_0}{2\pi}e^{-H(x)/kT} \tag{6.6.3}$$

它随温度降低迅速下降. 在 $T\to 0$ 时，热激发跃迁率为 0，此时由量子力学穿透势垒实现跃迁，跃迁率与 T 无关. 跃迁的宏观变量是结的相位 ϕ. 跃迁率是

$$\tau_{\text{MQT}}^{-1} = \frac{\omega_0}{2\pi}\left(\frac{b}{2\pi}\right)^{1/2} e^{-b}, \tag{6.6.4}$$

对流偏置结(旁路电阻 R,电容 C)在 $x \lesssim 1$ 时是

$$b = \frac{H(x)}{\hbar\omega_0}\left(7.2 + \frac{8A}{\omega_0 RC}\right). \tag{6.6.5}$$

括号中第二项是环境耗散的效应,$A=O(1)$. 当 ϕ 位于阱中时,其平均值在势阱最低处,并在它周围有频率为 ω_0 的振动. 当它跃出势垒时就将沿势曲线下滑,此时 $\dot{\phi}$ 就产生电压. 在文献[24]中的实验是在不同的温度(1.7K 到 5mK)下逐渐增加电流 I. 当电流增加到某一值时,结就从超导态(跨结电压为 0)过渡到正常态(跨结有电压). 将各温度的过渡电流分布 $P(I)$ 记录下来,当温度降低时 $P(I)$ 分布变窄并移向高电流值(见图 6.15). 插图给出结在 95mK 的电流-电压特性曲线. 垂直的两段代表结在超导态,接近水平的两段代表过渡到正常态,瞬间产生了电压,代表 ϕ 已跃过势垒. 从分布 $P(I)$ 可以计算出跃迁率 $\tau^{-1}(I)$. 在图 6.16 中给出两个结的 $\tau^{-1}(I)$,$\ln\tau^{-1}(I)$ 都接近于与 I 成正比. 当温度降低时,$\tau^{-1}(I)$ 向高 I 值推移,$\ln\tau^{-1}(I)$ 的斜率增加,在 $T \lesssim 100$mK 时斜率很少变化. 图中的实线代表热激发跃迁率(式(6.6.3))的理论结果. 虚线代表不考虑耗散的量子隧穿率,点线代表考虑耗散的量子隧穿率(式(6.6.4)、式(6.6.5)),它们都是与温度无关的. 从实验数据与理论的拟合中代表耗散的参数 A 被确定为 $A \approx 4.5$. 图 6.17 给出两个结 $P(I)$ 的宽度 $\Delta I = \langle(I-\langle I\rangle)^2\rangle^{1/2}$ 作为 T 的函数,实线、虚线和点线仍分别代表热激发、无耗散量子隧穿和有耗散($A=4.5$)量子隧穿的理论结果. 另一个实验组[25]对 $T=0$ 时量子隧穿率与耗散的关系作了报道,确证了理论的结果.

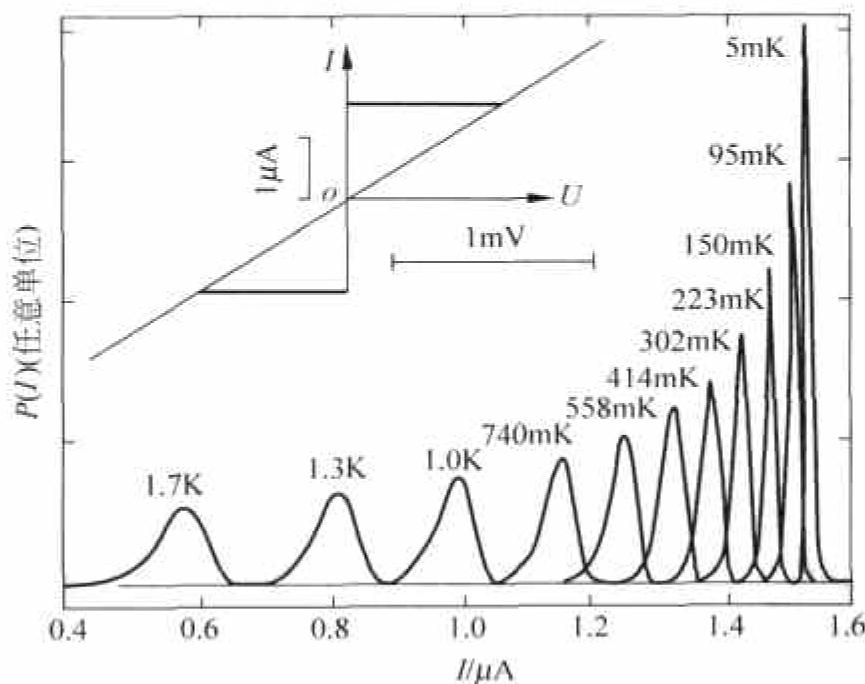


图 6.15 Josephson 结从超导到正常态的过渡电流分布 $P(I)$. 取自[24]

阱中的宏观量是跨结的相角差. 它不仅穿透势垒,而且在阱中还有不同的量子态[26]. 在 20 世纪 80 年代后期直到 90 年代有不少精确的实验.

Josephson 系统的宏观量子相干现象的实验发现已在 4.9 节讨论 Schrödinger 猫态时作过介绍. 这是实验研究的一项突破.

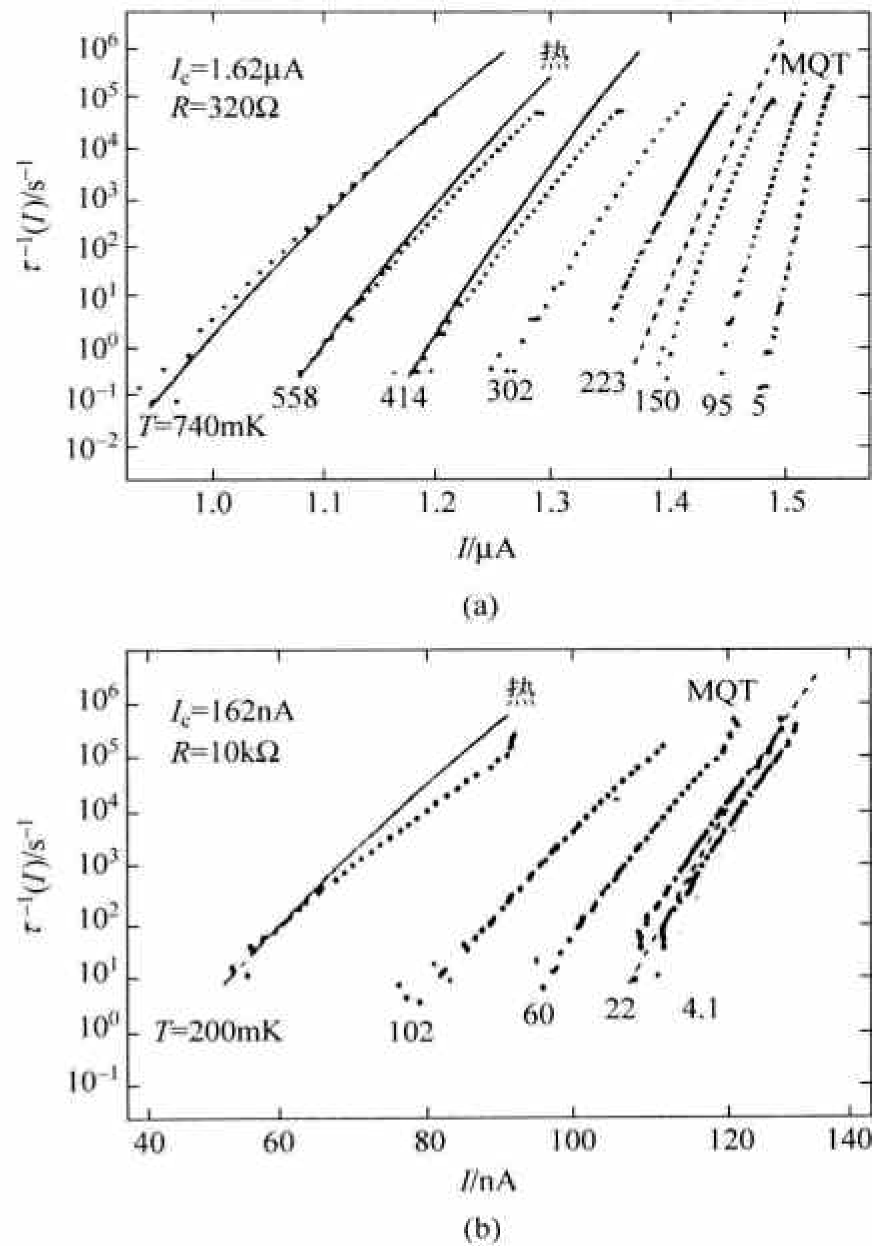


图 6.16 两个结的跃迁率 $\tau^{-1}(I)$. 取自[24]

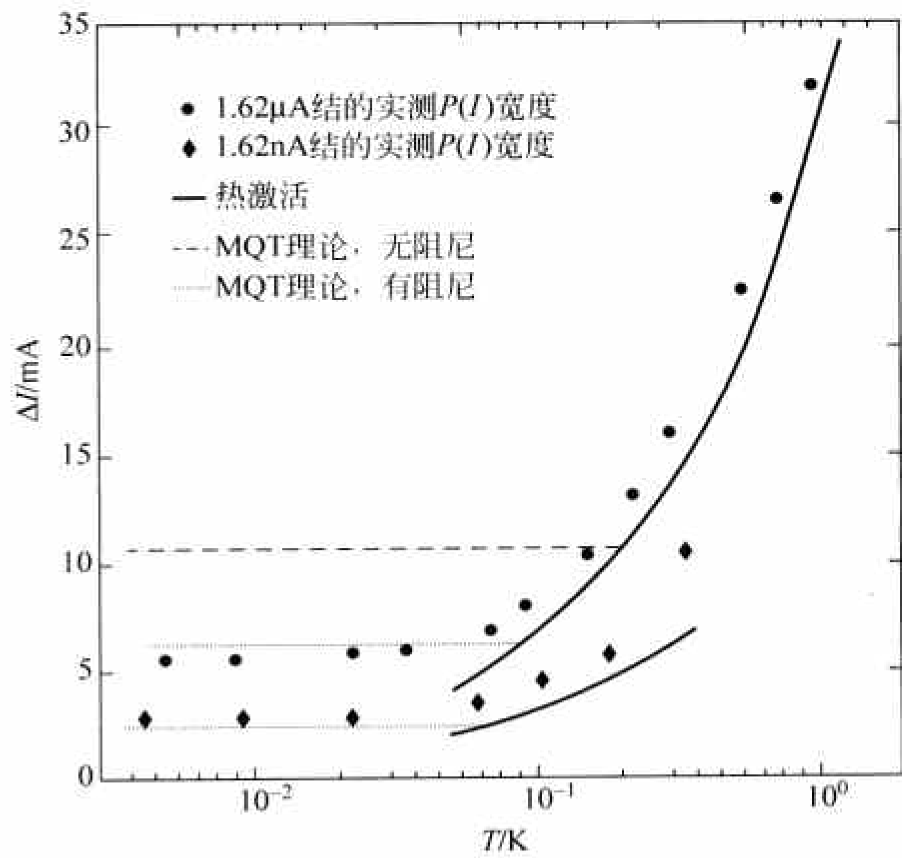


图 6.17 过渡电流分布 $P(I)$ 的宽度与温度的关系. 取自[24]

6.7 磁的宏观量子隧穿，自旋相干态

20 世纪 80 年代后期以前，讨论宏观量子现象多限于 Josephson 体系. 到 1988 年出现了关于磁的量子隧穿的理论讨论[27,28]，20 世纪 90 年代初就出现了实验工作. 此后理论、实验工作发展非常迅速. 到 1990 年代中已涌现出大量研究成果. 由于原子之间强的交换相互作用，出现铁磁、反铁磁单畴磁性颗粒可以有 $10^3 \sim 10^6$ 基本自旋作为一个整体而行动，而畴壁涉及 10^{10} 自旋. 这类问题称为"巨自旋"(giant spin). 作为宏观量，它们呈现量子性质，例如隧穿现象. 这类现象不仅具有理论意义，而且在信息的存储与操作上有重要的潜在实用意义. 在制造工艺和测量技术上的突破更为实验研究开辟了广阔的道路.

在磁隧穿的理论工作中需要用自旋相干态方法，以下先作简单介绍[29,30]. 它的构成是基于自旋算符代数的. 自旋算符 $\boldsymbol{S}$ 的分量是 (S_1, S_2, S_3)，Casimir 算符是 S^2，本征值是 $s(s+1)$，s 可以是整数或半整数. 先取基准态 $|m\rangle$，m 是 S_3 的本征值，$-s \leqslant m \leqslant s$. 取转动算符 $U(\theta,\phi)$，此处 θ 和 ϕ 是单位矢量 $\hat{\boldsymbol{\Omega}}$ 的球坐标极角及方位角，它将 z 轴转至 (θ,ϕ) 方向. $U(\theta,\phi)$ 的表达式是

$$U(\theta,\phi) = e^{-i\phi S_3} e^{-i\theta S_2}. \tag{6.7.1}$$

将 $U(\theta,\phi)$ 作用于 $|m\rangle$ 就得到自旋为 s，自旋在 $\hat{\boldsymbol{\Omega}}(\theta,\phi)$ 方向投影为 m 的状态，称为自旋相干态，记为 $|\boldsymbol{\Omega}\rangle$ 或 $|\theta,\phi\rangle$：

$$|\boldsymbol{\Omega}\rangle \equiv |\theta,\phi\rangle = U(\theta,\phi)\,|m\rangle = e^{-i\phi S_3} e^{-i\theta S_2}\,|m\rangle. \tag{6.7.2}$$

在两个指数函数间插入单位元 $I = \sum\limits_{n=-s}^{s} |n\rangle\langle n|$，得

$$|\theta,\phi\rangle = \sum_{n=-s}^{s} e^{-in\phi}\langle n|e^{-i\theta S_2}|m\rangle\,|n\rangle. \tag{6.7.3}$$

式中的矩阵元称为用角动量 s 表示的约化 Wigner 系数：

$$d^s_{nm}(\theta) \equiv \langle n|e^{-i\theta S_2}|m\rangle. \tag{6.7.4}$$

$m=s$(最高权)时，d 的表达式最简单：

$$d^s_{ns}(\theta) = \binom{2s}{s-n}^{1/2} \cos^{s+n}\frac{\theta}{2}\sin^{s-n}\frac{\theta}{2}. \tag{6.7.5}$$

单位元的分解是①

$$\frac{2s+1}{4\pi}\int |\theta,\phi\rangle\langle\theta,\phi|\sin\theta\,d\phi\,d\theta = I. \tag{6.7.6}$$

相干态的重叠是①

$$\begin{aligned}\langle\theta,\phi|\theta'\phi'\rangle &= \langle m|e^{i\theta S_2}e^{i(\phi-\phi')S_3}e^{-i\theta S_2}|m\rangle \\ &= \sum_{n=-s}^{s} d^s_{mn}(\theta)\,d^s_{mn}(-\theta')\,e^{i(\phi-\phi')n}.\end{aligned} \tag{6.7.7}$$

对 $m=s$(最高权)上式是

$$\langle\theta,\phi|\theta',\phi'\rangle = \left[\cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta'}{2}e^{i\frac{1}{2}(\phi-\phi')} + \sin\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta'}{2}e^{-i\frac{1}{2}(\phi-\phi')}\right]^{2s}$$

---

① 证明是直接的，请能阅文献[29]，[30].

$$= \left[\cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta'}{2}e^{i\frac{1}{2}(\phi-\phi')}\right]^{2s}\left[1+\tan\frac{\theta}{2}\tan\frac{\theta'}{2}e^{-i(\phi'-\phi)}\right]^{2s}. \tag{6.7.8}$$

上式还可以写作另一式样：

$$\langle \boldsymbol{\Omega} \mid \boldsymbol{\Omega}'\rangle = \mid \langle \boldsymbol{\Omega} \mid \boldsymbol{\Omega}'\rangle \mid e^{-i\Phi},$$

此处

$$\langle \boldsymbol{\Omega} \mid \boldsymbol{\Omega}'\rangle \mid = \left[\left(\cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta'}{2}+\sin\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta'}{2}\cos(\phi'-\phi)\right)^2 + \left(\sin\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta'}{2}\sin(\phi'-\phi)\right)^2\right]^s$$
$$= \left[\frac{1}{2}(1+\hat{\boldsymbol{\Omega}}\cdot\hat{\boldsymbol{\Omega}}')\right]^s,$$

$\hat{\boldsymbol{\Omega}}$ 与$\hat{\boldsymbol{\Omega}}'$的夹角 Φ 满足

$$\tan\Phi = \frac{\sin\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta'}{2}\sin(\phi'-\phi)}{\cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta'}{2}+\sin\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta'}{2}\sin(\phi'-\phi)}2s. \tag{6.7.9}$$

以上的讨论涉及了相干态的多种性质. 从它的参数标志看，参数是连续的. 不同标志的相干态不是正交的. 它们组成过完全的集合，通过单位元分解，可以把任意波函数用相干态展开.

对量子自旋系统，自旋相干态提供自然的半径典近似框架. 考虑路径积分的跃迁振幅，采用虚时间形式：

$$\left\langle \boldsymbol{\Omega}_f \,|\, e^{-\hat{H}(\tau_f-\tau_i)/\hbar} \,|\, \boldsymbol{\Omega}_i \right\rangle = \prod_{n=1}^{N}\left[\int\left(\frac{2s+1}{4\pi}d\,\boldsymbol{\Omega}_n\right)\right]\prod_{n=1}^{N+1}\left\langle \boldsymbol{\Omega}_n \,|\, e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} \,|\, \boldsymbol{\Omega}_{n-1}\right\rangle. \tag{6.7.10}$$

在上式中已将虚时间间隔 $\tau_f-\tau_i$ 分为小间隔 ϵ 的 N 等分，并将 N 个单位元分解插入指数函数因子之间. 式(6.7.10)的一个典型的因子是

$$\left\langle \boldsymbol{\Omega}_n \,|\, e^{-\epsilon\hat{H}/\hbar} \,|\, \boldsymbol{\Omega}_{n-1}\right\rangle = \langle \boldsymbol{\Omega}_n \mid 1-\epsilon\hat{H}/\hbar \mid \boldsymbol{\Omega}_{n-1}\rangle$$
$$= \langle \boldsymbol{\Omega}_n \mid \boldsymbol{\Omega}_{n-1}\rangle\left[1-\frac{\epsilon}{\hbar}\frac{\langle \boldsymbol{\Omega}_n \mid \hat{H} \mid \boldsymbol{\Omega}_{n-1}\rangle}{\langle \boldsymbol{\Omega}_n \mid \boldsymbol{\Omega}_{n-1}\rangle}\right], \tag{6.7.11}$$

以下分别计算上式中的各因子. 分开$\langle \boldsymbol{\Omega}_n | \boldsymbol{\Omega}_{n-1}\rangle$的振幅与相因子，

$$\langle \boldsymbol{\Omega}_n \mid \boldsymbol{\Omega}_{n-1}\rangle = \mid \langle \boldsymbol{\Omega}_n \mid \boldsymbol{\Omega}_{n-1}\rangle \mid e^{-i\Phi}.$$

据式(6.7.9)，振幅部分是$\left[\frac{1}{2}(1+\hat{\boldsymbol{\Omega}}_n\cdot\hat{\boldsymbol{\Omega}}_{n-1})\right]^s$，在 $N\to\infty$，$\epsilon\to 0$ 极限下，它趋近于 1. 相角在极限下是(据式(6.7.9))

$$\Phi \approx \tan\Phi \approx 2s\sin^2\frac{\theta}{2}\Delta\phi = s(1-\cos\theta)\Delta\phi,$$

此处 $\Delta\phi=\phi_n-\phi_{n-1}$. 由于 $\Delta\phi$ 已是带头项，且下面无限多的 $\Delta\phi$ 要相加，故此处应予保留. 总起来有

$$\langle \boldsymbol{\Omega}_n \mid \boldsymbol{\Omega}_{n-1}\rangle = e^{-is(1-\cos\theta)\Delta\phi} = e^{-is(1-\cos\theta)\dot{\phi}_n\epsilon}.$$

由于式(6.7.11)中方括弧中第二项前已有 ϵ 在，故两个矩阵元之商可弃去 $O(\epsilon)$项：

$$\frac{\langle \boldsymbol{\Omega}_n \mid \hat{H} \mid \boldsymbol{\Omega}_{n-1}\rangle}{\langle \boldsymbol{\Omega}_n \mid \boldsymbol{\Omega}_{n-1}\rangle} = \langle \boldsymbol{\Omega}_n \mid \hat{H} \mid \boldsymbol{\Omega}_n\rangle + O(\epsilon) \approx H(\Omega_n).$$

$H(\Omega_n)$已是 c 数，是 Hamilton 量在相干态$|\boldsymbol{\Omega}_n\rangle$的期待值. 式(6.7.11)已经计算完毕：

$$\langle\boldsymbol{\Omega}_n \mid e^{-\varepsilon\hat{H}/\hbar} \mid \boldsymbol{\Omega}_{n-1}\rangle = \exp\left[-\mathrm{i}\varepsilon s(1-\cos\theta)\dot{\phi}_n - \frac{\varepsilon}{\hbar}H(\boldsymbol{\Omega}_n)\right].$$

跃迁振幅(6.7.10)式已经可以写成路径积分形式：

$$\langle\boldsymbol{\Omega}_\mathrm{f} \mid \exp[-H(\tau_\mathrm{f}-\tau_\mathrm{i})/\hbar] \mid \boldsymbol{\Omega}\rangle = \int_{\boldsymbol{\Omega}(\tau_\mathrm{i})}^{\boldsymbol{\Omega}(\tau_\mathrm{f})}[D\boldsymbol{\Omega}(\tau)]\times$$
$$\exp\left[-\mathrm{i}s\int_{\tau_\mathrm{i}}^{\tau_\mathrm{f}}(1-\cos\theta)\dot{\phi}\mathrm{d}\tau - \frac{1}{\hbar}\int_{\tau_\mathrm{i}}^{\tau_\mathrm{f}}H(\boldsymbol{\Omega}(\tau))\mathrm{d}\tau\right]. \tag{6.7.12}$$

路径积分中指数上的量是$\boldsymbol{\Omega}(\tau)$的泛函，它和作用量 $S[\boldsymbol{\Omega}(\tau)]$成正比

$$\frac{1}{\hbar}S[\boldsymbol{\Omega}(\tau)] = \int_{\tau_\mathrm{i}}^{\tau_\mathrm{f}}\left[-\mathrm{i}s(1-\cos\theta)\dot{\phi}(\tau) + \frac{1}{\hbar}H(\boldsymbol{\Omega}(\tau))\right]\mathrm{d}\tau. \tag{6.7.13}$$

先讨论第一项的意义. 在图 6.18 中，单位球面上矢量$\boldsymbol{\Omega}(\theta,\phi)$，$\boldsymbol{\Omega}'(\theta+\mathrm{d}\theta,\phi+\mathrm{d}\phi)$与$\boldsymbol{\Omega}_0(\theta=0)$所夹的面积(斜线标出)是

$$\mathrm{d}\omega[\boldsymbol{\Omega}(\tau)] = \int_0^\theta \sin\theta'\mathrm{d}\theta'\mathrm{d}\phi = (1-\cos\theta)\mathrm{d}\phi. \tag{6.7.14}$$

如果路径积分中$\boldsymbol{\Omega}(\tau_\mathrm{i})=\boldsymbol{\Omega}(\tau_\mathrm{f})$，即$\boldsymbol{\Omega}(\tau)$描出一个封闭路径，则

$$\omega[\boldsymbol{\Omega}] = \int_{\tau_\mathrm{i}}^{\tau_\mathrm{f}}(1-\cos\theta)\dot{\phi}(\tau)\mathrm{d}\tau = \int_{\tau_\mathrm{i}}^{\tau_\mathrm{f}}(1-\cos\theta)\mathrm{d}\phi \tag{6.7.15}$$

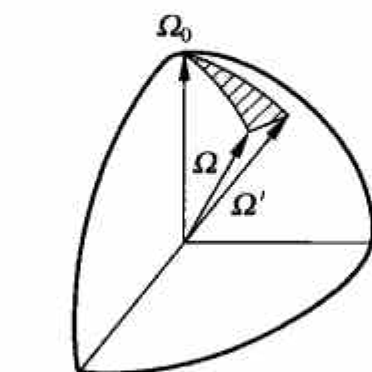


图 6.18　Wess-Zumino 项的几何意义

正是封闭路径在球面上所围出的面积. 有趣的是，球面是无边的，封闭曲线的"内"与"外"是无法区分的. 令封闭曲线两侧的面积为 S_1 与 S_2，而根据封闭曲线的描绘方向(任意确定)与面积外向法线的关系(例如右手螺旋)确定 S 的符号，则有 $S_1-S_2=4\pi$. 在式(6.7.12)中这个因子的贡献是 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}sS}$，而 s 是整数或半整数，故有 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}s4\pi}=1$. 因此有 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}sS_1}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}s(4\pi+S_2)}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}sS_2}$. 这个因子有几何根源，因为它和 Ω 在球面上描出径迹的快慢无关. Lagrange 量中的$-\mathrm{i}s(1-\cos\theta)\dot{\phi}$ 项称为 Wess-Zumino 项，在 7.2 节还将遇到它.

6.8　单畴铁磁粒子的宏观量子现象

考虑单畴铁磁粒子，其磁矩的大小 M 在过程中不变，原因是交换能远远大于磁各向异性能，使得磁矩 $\boldsymbol{M}$ 在量子过程中作为一个整体(宏观量)出现. 磁矩的方向由单位矢量$\hat{\boldsymbol{n}}(\theta,\phi)$表示. 由于晶体的磁各向异性，有各向异性能 $E_K(\theta,\phi)$. 使它取最低值的磁矩取向称易磁化方向(easy direction). 磁矩的大小和颗粒的总自旋成正比：$\boldsymbol{M}=\gamma\boldsymbol{s}$，此处 $\gamma=g\mu_\mathrm{B}$，μ_B 是 Bohr 磁子，g 是回磁比. 在有外磁场 $\boldsymbol{H}$ 存在时，磁矩的能量是

$$E = -\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{H} + E_K(\theta,\phi). \tag{6.8.1}$$

磁矩在磁场中的运动方程是

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{M}}{\mathrm{d}t} = -\gamma\boldsymbol{M}\times\frac{\delta E}{\delta\boldsymbol{M}}, \tag{6.8.2}$$

它称为 Landau-Lifshitz 方程，也称 Bloch 方程. $-\frac{\delta E}{\delta\boldsymbol{M}}$是磁矩感受到的有效磁场(外磁场加晶体各向导性场)，它在这个场的作用下进动. 由于 M 是常数，描述磁矩运动的实际是$\hat{\boldsymbol{n}}$. 将

式(6.8.2)用$\hat{\boldsymbol{n}}$表示，有

$$s\frac{\mathrm{d}\hat{\boldsymbol{n}}}{\mathrm{d}t}=-\hat{\boldsymbol{n}}\times\frac{\delta E}{\delta\hat{\boldsymbol{n}}},\tag{6.8.3}$$

此处 s 是颗粒自旋的大小. 将方程用(θ,ϕ)表示，有

$$\dot{\theta}\sin\theta=-\frac{\gamma}{M}\frac{\partial E}{\partial\phi},\tag{6.8.4}$$

$$\dot{\phi}\sin\theta=\frac{\gamma}{M}\frac{\partial E}{\partial\theta}.\tag{6.8.5}$$

这组方程可以从作用量导出：

$$I=\int\mathrm{d}tL=\int\mathrm{d}t\{s\dot{\phi}\cos\theta-E(\theta,\phi)\}.\tag{6.8.6}$$

由于在 Lagrange 量上加一项时间微商，不改变运动方程，则上式可改为

$$I=\int\mathrm{d}t\{-s(1-\cos\theta)\dot{\phi}-E(\theta,\phi)\}.\tag{6.8.7}$$

过渡到虚时间 $\tau=\mathrm{i}t$，欧氏作用量是

$$\begin{aligned}S\equiv-\mathrm{i}I&=\int\{\mathrm{i}s(1-\cos\theta)\dot{\phi}(\tau)+E(\theta,\phi)\}\mathrm{d}\tau\\&=\mathrm{i}s\omega[\hat{\boldsymbol{n}}]+\int\mathrm{d}\tau E(\theta,\phi).\end{aligned}\tag{6.8.8}$$

第一项是 Wess-Zumino 项. 和式(6.8.7)比较得知式(6.8.8)正是自旋相干态路径积分的指数上的因子. 严格地说，Wess-Zumino 项是自旋相干态的结果，从运动方程出发并不能唯一地得到它.

铁磁颗粒的宏观量子隧穿可以用 Callan-Coleman 方法处理，这方面的研究是由 E. Chudnovsky 和 L. Gunther[27,28]开始的.

6.8.1 量子相干：能级隧穿劈裂

考虑晶体各向异性能①

$$E(\theta,\phi)=K_1\cos^2\theta+K_2\sin^2\theta\sin^2\phi,\quad K_1>K_2>0.\tag{6.8.9}$$

x 轴($\theta=\pi/2,\phi=0$)是易磁化方向，y 轴是中等磁化方向，z 轴是难磁化方向. 在正负 x 轴方向，磁矩的能量是相等的. 由于 $\boldsymbol{M}$ 是膺矢量，若它原在 x 轴方向，经空间反演它将指向 $-x$ 轴. 它在 $\pm x$ 轴方向的性质必须相同，图 6.19 给出在 xy 平面上的能量曲线. 将式(6.8.9)代入运动方程式(6.8.4)、式(6.8.5)，得

$$\left.\begin{aligned}\dot{\theta}&=-\frac{2\gamma}{M}K_2\sin\theta\sin\phi\cos\phi,\\\dot{\phi}&=-\frac{2\gamma}{M}K_1(1-\lambda\sin^2\phi)\cos\theta;\end{aligned}\right\}\tag{6.8.10}$$

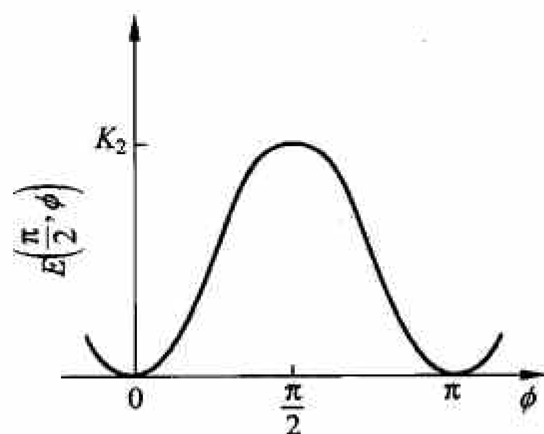


图 6.19 $E\left(\frac{\pi}{2},\phi\right)$能量曲线

此处 $\lambda=K_2/K_1$. 从式(6.8.10)可以得到瞬子"扭折"(kink)解所满足的对 ϕ 的运动方程，作法如下. 式(6.8.10)给出

① 以下讨论小磁性颗粒宏观量子隧穿，在无外磁场时各向异性能 E_K 就是总能量 E.

$$\frac{d\theta}{d\phi}=\frac{K_2\sin\theta\sin\phi\cos\phi}{K_1(1-\lambda\sin^2\phi)\cos\theta}.$$

积分一次，得

$$\ln\sin\theta=-\frac{1}{2}\ln(1-\lambda\sin^2\phi)+\text{const}, \tag{6.8.11}$$

或

$$\sin^2\theta(1-\lambda\sin^2\phi)=C. \tag{6.8.12}$$

用此式消去式(6.8.10)第二式中的 $\cos\theta$，得

$$\left(\frac{d\phi}{d\tau}\right)^2=-\left(\frac{2\gamma}{M}\right)^2K_1^2(1-\lambda\sin^2\phi)[-C+(1-\lambda\sin^2\phi)].$$

以下要求出瞬子扭折解，即 $\tau\to\pm\infty$ 时 $\phi\to0,\pi$，而 $\dot{\phi}\to0$. 将这些条件代入上式，定出 $C=1$. 再用 $\omega_0=\frac{2\gamma}{M}(K_1K_2)^{1/2}$，上式变为

$$\left(\frac{d\phi}{d\tau}\right)^2=\omega_0^2(1-\lambda\sin^2\phi)\sin^2\phi. \tag{6.8.13}$$

其解是

$$\phi=\arccos\frac{(1-\lambda)^{1/2}\tanh\omega_0\tau}{(1-\lambda\tanh^2\omega_0\tau)^{1/2}}. \tag{6.8.14}$$

在作用量表达式(6.8.8)中用运动方程及瞬子解条件(式(6.8.12))，其中 $C=1$，就得到瞬子作用量：

$$S_{\text{inst}}=K_2\int_{-\infty}^{\infty}d\tau2\sin^2\phi.$$

再用瞬子解式(6.8.14)进行积分，得

$$S_{\text{inst}}=-\frac{M}{\gamma}\ln\frac{1-\sqrt{\lambda}}{1+\sqrt{\lambda}}. \tag{6.8.15}$$

最后隧穿率 Γ 是

$$\Gamma=A\exp\left(-\frac{S_{\text{inst}}}{\hbar}\right)=A\exp\left[\frac{M}{\hbar\gamma}\ln\frac{1-\sqrt{\lambda}}{1+\sqrt{\lambda}}\right]=A\left[\frac{1-\sqrt{\lambda}}{1+\sqrt{\lambda}}\right]^{\frac{M}{\hbar\gamma}}. \tag{6.8.16}$$

A 是前置因子，它的计算比较复杂. 文献[31]给出磁隧穿前置因子的一般计算方法. 能级的隧穿劈裂是 $\Delta E=2\hbar\Gamma$. 式(6.8.16)表明，当 $\lambda\to1$ 时 $\Gamma\to0$. 原因是当 $\lambda\to1$ 时，$E\to\text{const}(M_z^2+M_y^2)=\text{const}(M^2-M_x^2)$，它和 M_x 对易，即 M_x 是运动常数，不会改变. λ 的值决定双阱间的垒高. λ 值较小时垒较低，隧穿较易.

6.8.2　量子隧穿

设 z 轴为易磁化方向，y 轴为难磁化方向，另在 $-z$ 轴方向加外磁场 H. 此时有

$$E(\theta,\phi)=(K_1+K_2\sin^2\phi)\sin^2\theta-MH(1-\cos\theta), \tag{6.8.17}$$

图 6.20 给出能量曲线. 外磁场的作用是使 $\theta=0$ 变为亚稳态，而 $\theta=\pi$ 是稳态. 二者之间的垒高及垒的位置可以用 H 调节. 垒位于 θ_1，$\cos\theta_1=H/H_c$，$H_c=2K_1/M$. 令 $\varepsilon=1-\frac{H}{H_c}$，则垒高为 $U=K_1\varepsilon^2$. H_c 是临界场强，当 H 增大到此值时，势垒消失. 量子隧穿是由横向各向异性

K_2 造成的，因为只有 $K_2 \neq 0$ 才能使 M_z 不是守恒量. 在这个问题中必须取近似才能获得解析解. 考虑到 K_2 的存在，经典轨道不会到 ϕ 值较大的区域. 另外为了使垒高度不大，也没 ε 为小值. 在此条件下 $\theta_1 \approx \sqrt{2\varepsilon}$，$\theta_2 \approx 2\sqrt{\varepsilon}$. 从 $E(\theta,\phi)$ 得到运动方程：

$$\dot{\theta} = \frac{\gamma}{M} 2K_2 \sin\theta \sin\phi \cos\phi, \tag{6.8.18}$$

$$\dot{\phi} = -\frac{\gamma}{M}(2K_1 \cos\theta - MH). \tag{6.8.19}$$

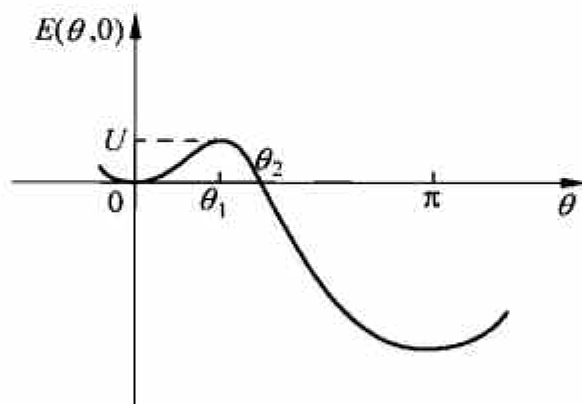


图 6.20 易磁化方向有外磁场，并有横向磁各向异性的能量曲线

在式(6.8.19)中 $K_2 \sin^2\phi$ 相对于其他项为小量，故被略去. 式(6.8.18)右方仅有一项，予以保留. 式(6.8.19)给出 $\dot{\phi}$ 与 $\cos\theta$ 的关系. 为了得到 θ 的运动方程，还须用式(6.8.19)将式(6.8.18)中的 ϕ 消去. 为此要将式(6.8.18)对 τ 取微商. 此时 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\sin\phi$ 给出 $\cos\phi\,\dot{\phi}$，这是 $\ddot{\theta}$ 的带头项. $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\gamma}\cos\phi$ 项与 $\sin\phi$ 成正比，和带头项相比就略去了，而 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\sin\theta$ 项中因有因子 $\sin\phi$ 也可略去. 最后考虑到 θ_1，θ_2 都是小量，回弹解仅限于小 θ 角，得到

$$\ddot{\theta} \approx \omega_0^2 \left(\varepsilon\theta - \frac{\theta^3}{2}\right). \tag{6.8.20}$$

注意到 θ_1，$\theta_2 \propto \sqrt{\varepsilon}$，而 $\varepsilon\theta$ 和 θ^3 都正比于 $\varepsilon^{3/2}$，是同量级的. 式中 $\omega_0 = \frac{2\gamma}{M}(K_1 K_2)^{1/2}$.

回弹解的边界条件是：$\tau \to \pm\infty$，$\theta = 0$；$\tau = 0$，$\theta = \theta_2$，$\dot{\theta} = 0$. 用这些条件解式(6.8.20)，得

$$\theta = \frac{\theta_2}{\cosh(\omega_0 \sqrt{\varepsilon}\tau)}. \tag{6.8.21}$$

回弹解的作用量是

$$S_{\mathrm{E}} = \frac{8M}{3\gamma}(K_1 K_2)^{1/2} \varepsilon^{3/2}, \tag{6.8.22}$$

隧穿率是

$$\Gamma = A\exp\left[-\frac{8M}{3\hbar\gamma}\left(\frac{K_1}{K_2}\right)^{1/2} \varepsilon^{3/2}\right], \tag{6.8.23}$$

此处 A 是前置因子. 在进行实验测量时，在温度较高条件下，跨越势垒主要靠热激发，弛豫率和 $\mathrm{e}^{-U/kT}$ 成正比，此处 U 是垒高，$U = K_1\varepsilon^2$. 温度降低后，量子隧穿起主要作用，隧穿率不再和温度有关. 转变温度(crossover temperature) T_c 满足

$$\frac{K_1 \varepsilon^2}{kT_c} = \frac{8M}{3\hbar\gamma}\left(\frac{K_1}{K_2}\right)^{1/2} \varepsilon^{3/2},$$

即

$$T_c = 3\hbar\gamma(K_1K_2)^{1/2}\sqrt{\varepsilon}/8kM. \tag{6.8.24}$$

6.8.3 量子干涉(拓扑淬灭)现象

在磁隧穿问题的 Lagrange 量中,Wess-Zumino 项对路径积分的跃迁振幅提供一个相因子,它对运动方程没有影响.1992 年两篇文章[32,33]指出这个相因子的一种特殊效应:双势阱中两个简并能量最低态间的跃迁有不同的路径时,它们对跃迁振幅的贡献有可能完全抵消,从而导致隧穿劈裂为零.抵消与否决定于自旋值是整数还是半整数.这和一维反铁磁链的 Haldane 猜想①遥相呼应.考虑如图 6.19 所示的量子相干情况,体系的 Hamilton 量是

$$\hat{\mathscr{H}} = k_1 J_x^2 + k_2 J_y^2. \tag{6.8.25}$$

经典能量是式(6.8.9):

$$E(\theta,\phi) = \langle \hat{\boldsymbol{n}} \mid \hat{H} \mid \hat{\boldsymbol{n}} \rangle = K_1\cos^2\theta + K_2\sin^2\theta\sin^2\phi,$$

此处 $K_1 = k_1J^2$,$K_2 = k_2J^2$. Hamilton 量式(6.8.25)是时间反演不变的.根据 Kramers 定理②,它的所有半整数角动量的能量本征态都是二重简并的.半整数 J 的基态是二重简并的,意味着隧穿劈裂为 0.这个结果在用路径积分计算隧穿率时是怎么发生的呢?注意到 Wess-Zumino 项式(6.8.8)中的 $\int \mathrm{i}s\dot{\phi}\,\mathrm{d}\tau$ 部分,它对跃迁振幅贡献一个相角:

$$\mathrm{i}s\int\dot{\phi}\,\mathrm{d}\tau = \mathrm{i}s\{\phi(\tau_f) - \phi(\tau_i)\}. \tag{6.8.26}$$

考虑经典轨道扭折解.$\phi(\tau_i)=0$,$\phi(\tau_f)=\pi$ 是一个解,而 $\phi(\tau_i)=0$,$\phi(\tau_f)=-\pi$ 是不同路径的解,但始末态都是一样的.由于它们的对称性,S_E 和前置因子也完全相同.它们对跃迁振幅的总贡献是

$$A(\mathrm{e}^{\mathrm{i}s\pi} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}s\pi})\mathrm{e}^{-S_E/\hbar} = 2A\cos s\pi\,\mathrm{e}^{-S_E/\hbar}, \tag{6.8.27}$$

对半整数 s 它给出 0. Wess-Zumino 项的全时间微商部分保证了 Kramers 定理的成立③. A. Garg[35]进一步考虑了在式(6.8.25)中加一项 $-\gamma HJ_z$,即在 z 方向加上处磁场 H:

$$\hat{\mathscr{H}} = k_1 J_z^2 + k_2 J_y^2 - \gamma HJ_z. \tag{6.8.28}$$

简并极小移至 $\theta=\theta_0$,$\phi=0,\pi$;$\cos\theta_0 = \dfrac{H}{H_c}$,$H_c = \dfrac{2k_1s}{\gamma}$.这仍是一个量子相干问题,只是有了磁场破坏了时间反转不变性,因而 Kramers 定理不再适用.但 Wess-Zumino 现还在,它的作用如何呢?运动方程式(6.8.2)用虚时间表示,是

$$\mathrm{i}s\frac{\mathrm{d}\hat{\boldsymbol{n}}}{\mathrm{d}\tau} = -\hat{\boldsymbol{n}} \times \frac{\partial E(\theta,\phi)}{\partial \hat{\boldsymbol{n}}}. \tag{6.8.29}$$

它导致能量守恒

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\tau} = 0.$$

令 $u=\cos\theta$,$u_0=\cos\theta_0$,$\lambda=K_2/K_1$,并将 $E(\theta,\phi)$ 改写(加一常数):

---

① 请参阅第 7 章 7.2 节.

② 请参阅文献[34].

③ 请参阅 6.12 节.

$$E(u,\phi) = K_1\{(u-u_0)^2 + \lambda(1-u^2)\sin^2\phi\}. \tag{6.8.30}$$

能量守恒给出

$$E(u,\phi) = E(u_0,0) = 0. \tag{6.8.31}$$

将式(6.8.31)解出，有

$$u = \frac{u_0 + i\lambda^{1/2}\sin\phi(1-u_0^2-\lambda\sin^2\phi)^{1/2}}{(1-\lambda\sin^2\phi)}. \tag{6.8.32}$$

由于运动方程式(6.8.29)中 τ 是虚时间，因此 θ,ϕ 都可能为复数，作用量也因之为复数. 选择磁场使得 $u_0^2<1-\lambda$，并选 $\phi(\tau)$ 为实数，则式(6.8.32)的平方根也为实数. 由于对称性，瞬子(扭折)解有两个，即 $\theta_\pm(\tau)$，$\phi_\pm(\tau)$. 它们从同一点$(\theta_0,0)$开始沿相反方向绕难磁化方向 z 轴绕行，最后到达同一点$(\theta_0,\pm\pi)$，见图 6.21. $\phi_\pm(-\infty)=0$，$\phi_\pm(+\infty)=\pm\pi$，$\phi_+(\tau)=-\phi_-(\tau)$. 从式(6.8.32)可以计算 $\omega[\hat{\boldsymbol{n}}]$的实部 ω_r：

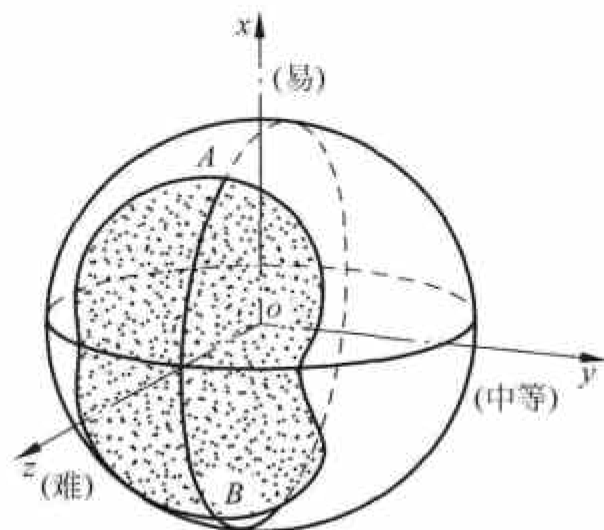


图 6.21 单位球上两个简并最低态 A 和 B 由两个瞬子解连接

$$\begin{aligned}\omega_{r,\pm} &= \int_0^{\pm\pi}\left(1-\frac{u_0}{1-\lambda\sin^2\phi}\right)d\phi \\ &= \pm\pi(1-u_0(1-\lambda)^{-\frac{1}{2}}).\end{aligned} \tag{6.8.33}$$

它将给出 $e^{-S_E/\hbar}$的相因子部分. 隧穿劈裂是

$$\Gamma = De^{-S_r/\hbar}(e^{is\omega_{r+}} + e^{is\omega_{r-}}) = 2De^{-S_r/\hbar}\cos\phi(H), \tag{6.8.34}$$

此处下标 r 意为实部，D 为常数，

$$\phi(H) = \frac{\omega_{r+}-\omega_{r-}}{2}. \tag{6.8.35}$$

$$(\omega_{r+}-\omega_{r-})/2 = \pi(1-u_0(1-\lambda)^{-1/2})$$

正是图 6.21 上阴影的面积. 当

$$s\pi(1-u_0(1-\lambda)^{-1/2}) = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi,$$

即

$$\frac{H}{H_c} = u_0 = (1-\lambda)^{1/2}\frac{1}{s}\left(s-n-\frac{1}{2}\right) \tag{6.8.36}$$

时，隧穿劈裂为 0. 图 6.22 给出劈裂作为磁场强度的函数，参数是：$K_1=1$，$\lambda=0.1$. 实线为 $s=10$，虚线为 $s=19/2$. 因此，不论 s 是整数或半整数，随 H 的变化隧穿劈裂都周期性振荡. 当然 $H=0$ 时，正好半整数 s 的隧穿被淬灭. 这种完全源于 Wess-Zumino 项的两个对称的瞬子解对隧穿率贡献的干涉现象被称为量子干涉，或拓扑淬灭. 这种现象在 Josephson 体系的宏观量子现象中是没有的.

以上讨论的是量子相干现象. 在量子隧穿现象中是否有类似的拓扑干涉呢？在隧穿问题的计算中起作用的是回弹解. 由于回弹解起点和终点是一个$\hat{\boldsymbol{n}}(-\infty)=\hat{\boldsymbol{n}}(+\infty)$，对每一个回弹解本身 ω_r 都为 0，因此不出现量子干涉. Chudnovsky 和 DiVicenzo[35] 计算了不对称双阱情况下从浅阱基态通过隧穿到深阱中一个能量极相近的状态的概率，发现它随磁场 H(它造成双阱不对称)也有振荡. Garg[37] 对此作了深入的讨论，指出区别在于如何对深阱中能级宽度(源于环境的耗散强度)以及深阱中能级间距离作出假定. 如果宽度小，能级间距

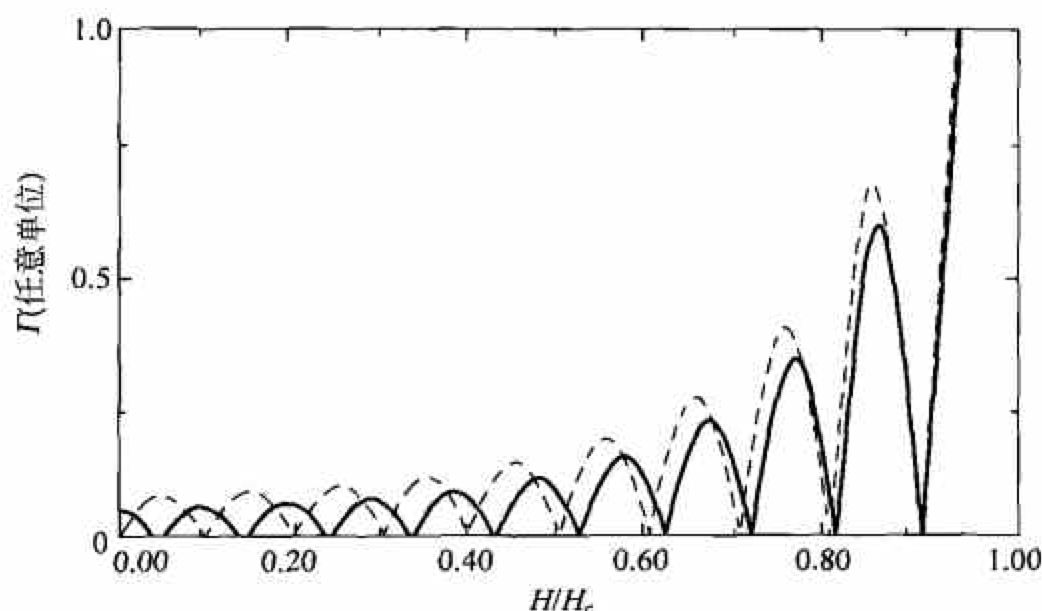


图 6.22　劈裂作为 H/H_c 的函数

大，就会出现隧穿率随 H 的振荡，但这时是类似量子相干的情况，系统会在两个阱间往复振荡（"共振"）. 如果宽度大，能级间距小，形成能级的连续分布，则类似"二次加三次"势的情况，隧穿率就不会出现振荡.

以上讨论的具体系统，其 Hamilton 量对绕 z 轴旋转 π 是不变的，即具有二重旋转对称性. 拓扑淬灭的结论还可以推广到 M 重旋转对称性（绕 z 轴转 $2\pi/M$）的情况. 当自旋量子数 S 不为 $M/2$ 的整数倍时，在 $|s\rangle$ 与 $|-s\rangle$ 间的跃迁被冻结：

$$s \neq 0(\mathrm{mod}\ M/2) \Rightarrow \langle -s \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t} \mid s\rangle = 0.$$

在文献中这个效应被称为自旋奇偶效应（spin parity①effect）[38]，在这方面还有不少工作[39,40,41].

自旋奇偶效应除了与 Wess-Zumino 项有联系外，是否也是量子力学原理的体现呢？这个问题将在 6.12 节中讨论.

6.9　单畴反铁磁粒子的宏观量子现象

反铁磁粒子的磁性可以看成是两套交叠的铁磁子格子组成. 一套具有磁化强度 $\boldsymbol{m}_1$，另一套具有磁化强度 $\boldsymbol{m}_2$. 由于强交换作用它们都作为整体参与过程. 两套子格子磁化强度基本上大小相等，即 $m_1 \approx m_2$，但方向相反. $\boldsymbol{m}_1 + \boldsymbol{m}_2 = \boldsymbol{m}$ 是没有完全抵消的剩余. 它的大小远比 m_1, m_2 小，即 $m \ll m_1, m_2$；反铁磁的序参量称 Néel 矢量，它的定义是

$$\boldsymbol{l} = \frac{\boldsymbol{m}_1 - \boldsymbol{m}_2}{2m_1}. \tag{6.9.1}$$

为了导出反铁磁颗粒的 Lagrange 量，这里采取两套子格子的 chudnovsky 做法[42]，所得结果极易推广到亚铁磁. 两套平行交叠的子格子磁化强度间有强的交换作用耦合，即 $\chi_\perp^{-1} \boldsymbol{m}_1 \cdot \boldsymbol{m}_2$，$\chi_\perp \ll 1$. 以 (θ_1, ϕ_1)，(θ_2, ϕ_2) 分别代表 $\boldsymbol{m}_1$ 和 $\boldsymbol{m}_2$ 的方向，暂不计晶体各向异性能，两套格子的 Lagrange 量（虚时间形式）是

① parity 指自旋为半整数的偶数倍（整数自旋）或奇数倍（半整数自旋）.

$$\mathscr{L}_0 = V\left\{ \mathrm{i}\frac{m_1}{\gamma}\dot{\phi}_1(1-\cos\theta_1) + \mathrm{i}\frac{m_2}{\gamma}\dot{\phi}_2(1-\cos\theta_2) + \frac{1}{\chi_\perp}m_1 m_2(\sin\theta_1\sin\theta_2\cos(\phi_1-\phi_2)+\cos\theta_1\cos\theta_2+1) \right\}, \quad (6.9.2)$$

此处 $\dot{\phi}_1$，$\dot{\phi}_2$ 代表对虚时间 τ 的微商，在花括号中加进了常数 1. 在本节中颗粒的体积 V 是明显写出的，因此 $\boldsymbol{M}_1=\boldsymbol{m}_1 V$，$\boldsymbol{M}_2=\boldsymbol{m}_2 V$，各向异性参数 $K_\perp$，$K_\parallel$ 都是以单位体积计.

在以下内容中限于考虑在始态与终态间的低作用量轨道. 由于$\chi_\perp^{-1}\gg 1$，$\boldsymbol{m}_1$ 和 $\boldsymbol{m}_2$ 基本上方向相反，因此设

$$\theta_2 = \pi - \theta_1 - \varepsilon_\theta, \quad \phi_2 = \pi + \phi_1 + \varepsilon_\phi,$$

其中

$$|\varepsilon_\theta|, |\varepsilon_\phi| \ll 1. \quad (6.9.3)$$

在 τ_i 及 τ_f 时，ε_θ，ε_ϕ 为 0. 将式(6.9.3)代入式(6.9.2)，保留到 ε_θ^2，ε_ϕ^2(在有一次项时弃去二次项)，得

$$\mathscr{L}_0 = V\left\{ \mathrm{i}\frac{m_1+m_2}{\gamma}\dot{\phi}_1 - \mathrm{i}\frac{m}{\gamma}\dot{\phi}_1\cos\theta - \mathrm{i}\frac{m_2}{\gamma}\varepsilon_\theta\dot{\phi}_1\sin\theta_1 + \mathrm{i}\frac{m_2}{\gamma}\varepsilon_\phi\sin\theta_1\dot{\theta}_1 + \frac{1}{2\chi_\perp}m_1 m_2\varepsilon_\theta^2 + \frac{1}{2\chi_\perp}m_1 m_2(\sin\theta\varepsilon_\phi)^2 \right\}. \quad (6.9.4)$$

现在路径积分是

$$\int[D\theta_1][D\phi_1][D\varepsilon_\theta][D\varepsilon_\phi]\exp[-\frac{1}{\hbar}\int\mathscr{L}_0\mathrm{d}\tau].$$

将 $\mathscr{L}_0$ 代入并对 ε_θ 和 $\varepsilon_\phi\sin\theta_1$ 作 Gauss 积分，在积分之后将(θ_1,φ_1)改写为(θ,ϕ)，最后得到

$$\int[D\theta][D\phi]\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int\mathscr{L}_0^{\mathrm{eff}}\mathrm{d}\tau\right],$$

其中

$$\mathscr{L}_0^{\mathrm{eff}} = V\left\{ \mathrm{i}\frac{m_1+m_2}{\gamma}\dot{\phi} - \mathrm{i}\frac{m}{\gamma}\dot{\phi}\cos\theta + \frac{\chi_\perp}{2\gamma^2}(\dot{\theta}^2+\dot{\phi}^2\sin^2\theta) \right\}. \quad (6.9.5)$$

需要说明的是，本来(θ_1,ϕ_1)，(θ_2,ϕ_2)都是独立的"历史". 由于对反铁磁情况作了近似(式(6.9.3))，再经过对 ε_θ，ε_ϕ 的路径积分后得到一对角度(θ_1,ϕ_1)作为广义坐标的体系，而偏离反平行的效应也包含在 $\mathscr{L}_0^{\mathrm{eff}}$ 中了. 它描述反铁磁的物理. 加入单位体积的磁各向异性能 $E_K(\theta,\phi)$，跃迁振幅的路径积分形式是

$$\int[D\theta(\tau)][D\phi(\tau)]\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int\mathscr{L}\mathrm{d}\tau\right],$$

此处

$$\mathscr{L} = V\int\left\{ \mathrm{i}\frac{m_1+m_2}{\gamma}\dot{\phi} - \mathrm{i}\frac{m}{\gamma}\dot{\phi}\cos\theta + \frac{\chi_\perp}{2\gamma^2}(\dot{\theta}^2+\dot{\phi}^2\sin^2\theta) + E_K(\theta,\phi) \right\}\mathrm{d}\tau. \quad (6.9.6)$$

考虑完全反铁磁的情况，$m=0$，Lagrange 量(虚时间)是

$$\mathscr{L} = V\int\left\{ \mathrm{i}\frac{m_1+m_2}{\gamma}\dot{\phi} + \frac{\chi_\perp}{2\gamma^2}(\dot{\theta}^2+\dot{\phi}^2\sin^2\theta) + E_K(\theta,\phi) \right\}\mathrm{d}\tau. \quad (6.9.7)$$

在 1990 年讨论反铁磁颗粒量子隧穿的第一批工作[43,44]所用的 Lagrange 量和式(6.9.7)相比缺少第一项. 他们的 Lagrange 量是从两套子格子磁矩的运动方程出发导出的. 在 6.8 节已经指出，正确的 Lagrange 量只有从自旋相干态才能导出.

以下从式(6.9.7)出发讨论隧穿问题.

设

$$E_K = K_{\perp}\cos^2\theta + K_{\parallel}\sin^2\theta\sin^2\phi, K_{\perp} \gg K_{\parallel}, \tag{6.9.8}$$

即 x 轴是易磁化方向，z 轴是难磁化方向. 隧穿中的始态和终态示于图 6.23. 考虑到 $K_{\perp} \gg K_{\parallel}$，可弃去式(6.9.7)中的 $\dot{\theta}^2$，然后可以对 $\cos\theta$ 进行 Causs 积分，进一步得到跃迁振幅的路径积分表达式

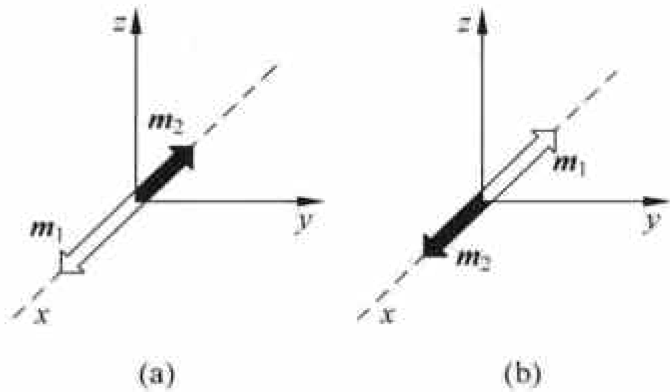


图 6.23 反铁磁颗粒隧穿的始态(a)和终态(b)

$$\int[D\phi(\tau)]\exp\left\{-\frac{V}{\hbar}\int d\tau\left[i\frac{m_1+m_2}{\gamma}\dot{\phi}+\frac{1}{2}(I_f+I_a)\dot{\phi}^2+K_{\parallel}\sin^2\phi\right]\right\}, \tag{6.9.9}$$

此处

$$I_f = \frac{m^2}{2\gamma^2 K_{\perp}}, \quad I_a = \frac{\chi_{\perp}}{\gamma^2}$$

分别是铁磁和反铁磁转动惯量. 路径积分由经典瞬子解及其附近的轨道所主导，运动方程是

$$\ddot{\phi} = \frac{K_{\parallel}}{I_f + I_a}\sin 2\phi = \omega_0^2\sin 2\phi, \tag{6.9.10}$$

此处用了定义

$$\omega_0 = \left(\frac{K_{\parallel}}{I_f + I_a}\right)^{1/2} = \gamma\left(\frac{2K_{\parallel}K_{\perp}}{m^2 + 2\chi_{\perp}K_{\perp}}\right)^{1/2}. \tag{6.9.11}$$

方程的解是瞬子扭折解

$$\phi = \pm 2\arctan e^{\sqrt{2}\omega_0\tau}, \tag{6.9.12}$$

$\phi(-\infty)=0$，$\phi(\infty)=\pm\pi$ 代表两个路径不同但始末态都相同的经典解，它们相加将给出拓扑干涉结果. 式(6.9.9)中的作用量第一项给出

$$V\int i\frac{m_1+m_2}{2\gamma}d\phi,$$

它对相因子的贡献是

$$\exp\left[-\frac{V}{\hbar\gamma}i(m_1+m_2)\Delta\phi\right] = e^{-i(S_1+S_2)\Delta\phi},$$

此处 $S_1 = \frac{V}{\hbar\gamma}m_1$ 是第一套格子的总自旋，S_2 是第二套格子的总自旋，$\Delta\phi$ 是

$$\Delta\phi = \begin{cases} \pi, & \text{逆时针转动隧穿;} \\ -\pi, & \text{顺时针转动隧穿.} \end{cases}$$

对历史求和给出 $2\cos(S_1+S_2)\pi = \cos(S\pi + 2S_2\pi)$，此处 $S = S_1 - S_2$ 是未抵消的粒子总自旋. $2S_2$ 是整数，以上因子即是 $\pm\cos S\pi$. 若 S 是整数，它给出 ± 1，若 S 是半整数，它给出 0. 从经典解可以得出经典作用量

$$S_E = V\int d\tau\left\{\frac{1}{2}(I_f + I_a)\dot{\phi}^2 + K_{\parallel}\sin^2\phi\right\} = V\int d\tau 2K_{\parallel}\sin^2\phi,$$

积分直接计算给出

$$\int_{-\infty}^{\infty}\sin^2\phi\,\mathrm{d}\tau=\frac{1}{\sqrt{2}\,\omega_0}\tanh\sqrt{2}\,\omega_0\tau\Big|_{-\infty}^{\infty}=\frac{\sqrt{2}}{\omega_0}.$$

将它代回,得

$$S_E=V2K_\parallel\frac{\sqrt{2}}{\omega_0}=V\frac{2}{\gamma}\left(2\chi_\perp K_\parallel+m^2\frac{K_\parallel}{K_\perp}\right)^{1/2}. \tag{6.9.13}$$

隧穿率(不细算前置因子)是

$$\Gamma\approx\cos(S\pi)\omega_0\exp\left[-\frac{2V}{\hbar\gamma}\left(2\chi_\perp K_\parallel+m^2\frac{K_\parallel}{K_\perp}\right)^{1/2}\right]. \tag{6.9.14}$$

以上的结果在铁磁极限($m_1\gg m_2$,未抵消部分 $m\gg\sqrt{\chi_\perp K_\perp}$),以及反铁磁极限($m_1\approx m_2$,$m\ll\sqrt{\chi_\perp K_\perp}$)时,式(6.9.11)、式(6.9.13)分别和文献[27]以及[43],[44]符合,比早期工作超出的是拓扑干涉因子.从式(6.9.14)还可以看到,只要 $m\neq0$(不论多小),$K_\perp\neq0$ 对给出有限的隧穿率是必要的.原因是,如果 $K_\perp=0$,$\boldsymbol{m}$ 将是守恒的,它无法隧穿.对铁磁颗粒,$S_E\propto\sqrt{\frac{K_\parallel}{K_\perp}}$,只有在 $K_\perp\gg K_\parallel$ 时隧穿率才有可能不致太小.对反铁磁颗粒 $S_E\propto\sqrt{K_\parallel\chi_\perp}$,而$\chi_\perp\ll1$,因此隧穿率一般要大得多.

在以上两节讨论中未涉及环境对量子隧穿的影响,实际在理论上这是很重要的问题.在不同固体中造成耗散的原因也不同,例如自由电子、涡旋、磁振子、声子等,A. Garg[45]曾有系统的研究.

6.10 磁体系宏观量子现象实验

多数磁量子隧穿实验是用磁弛豫方法.例如 Barbara 等[46]测量子 $Tb_{0.5}Ce_{0.5}Fe_2$ 铁磁粒子,平均大小是 15nm.先将样品置于 8T 强场中使磁化饱和,然后将场减至 0,再反向将场置于$\lesssim H_c$ 值.磁化强度就位于亚稳态(如图 6.20).然后测样品磁化强度随时间的变化.对单畴、无相互作用的粒子,磁化弛豫遵循

$$M(t)=M(0)\mathrm{e}^{-\Gamma t}. \tag{6.10.1}$$

在温度高时热激发是渡越势垒 U 的机制,

$$\Gamma=\omega\mathrm{e}^{-U/kT^*}. \tag{6.10.2}$$

T^* 称逃逸温度.在样品温度 T 高时,$T^*=T$.但当 T 降至一定程度时,Γ 即不再随 $1/T$ 指数下降,而趋于一个不依赖温度的值,即 T^* 趋于一个常数.这个过程表明量子隧穿参与了弛豫,然后占有主要的位置.图 6.24 给出这个变化.多数磁体系并不是单畴的,它们的势垒具有相当宽的分布,在弛豫过程中并不遵守指数规律.磁化强度的演化是[47]

$$M(t)=M(t_0)\left[1-S(T,H)\ln\frac{t}{t_0}\right], \tag{6.10.3}$$

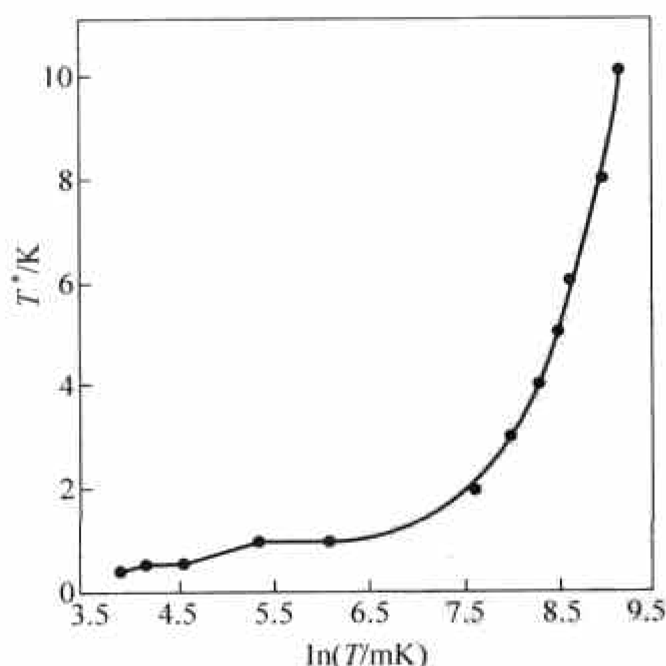


图 6.24 逃逸温度 T^* 随样品温度 T 的变化

$S(T,H)$称为磁黏滞性，它对温度和磁场的依赖表征体系的弛豫行为. J. Tejada 和张西祥[48]对多种体系进行了磁弛豫研究. 磁黏滞性在温度高时随温度降低而下降，而在转变温度处趋于常数. 图 6.25 给出随机 $TbFe_3$ 磁薄膜的磁黏滞性在不同磁场下随温度的变化. 由于平均垒高随 H 的增大而降低，量子隧穿率就增高，这相当于更高的逃逸温度. 文献[48]还给出了对 $TbFeO_3$ 反铁磁单晶的指数弛豫结果，示于图 6.26. 从实验数据可以得到垒高作为磁场 H 的函数和推出尝试频率 ω. 这使得理论可以和实验比较.

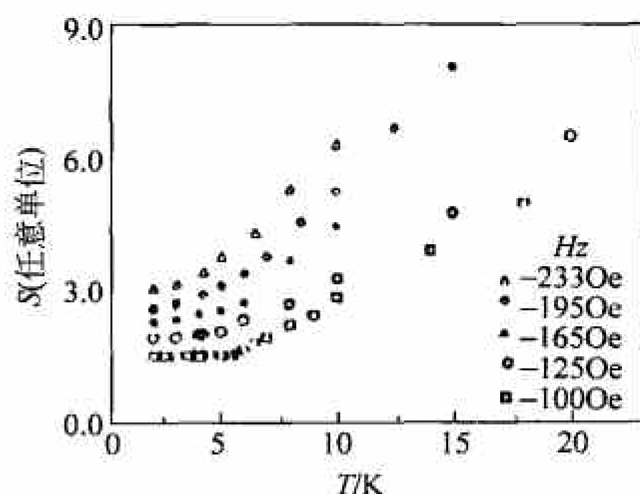


图 6.25 随机 $TbFe_3$ 磁薄膜磁黏滞性随温度的变化(1Oe=79.58A/m). 取自[48]

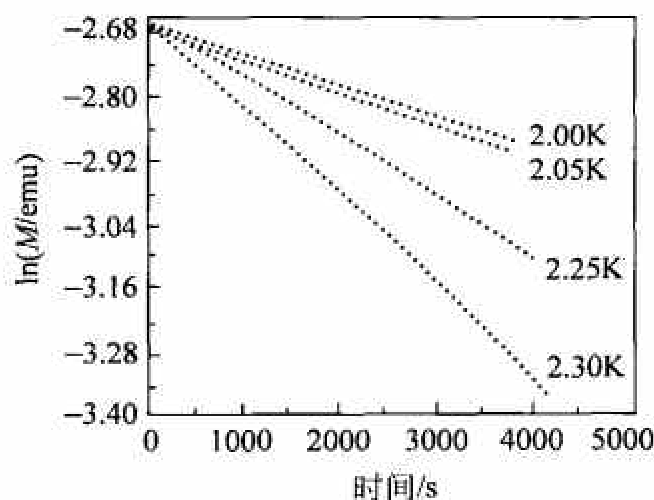


图 6.26 反铁磁单晶 $TbFeO_3$ 磁化强度①的指数弛豫. 取自[48]

D. Awshalom[49,50,51]研究组利用小反铁磁粒子作另一个类型的实验. 无外磁场时，晶体各向异性形成对称双阱是量子相干的条件，Néel 矢量可以在两个阱间往返振荡. 如果两套格子的磁矩未完全抵消，则在 $\boldsymbol{l}$ 振荡时，$\boldsymbol{m}$(未抵消磁矩)跟随 $\boldsymbol{l}$ 一起往返振荡②. 纳米磁性颗粒取自天然的和人造的铁朊(ferritin). 马脾脏中的铁朊是蛋白质的球壳，其外直径12.5nm，内直径 7.5nm. 天然铁朊内含 $5Fe_2O_3\cdot 9H_2O$，它在 240K 以下是单畴反铁磁. 每个粒子含有约 4500 自旋 $5/2Fe^{3+}$ 离子. 由于大的表面-体积化，两套子格磁矩未完全抵消，正好成为反铁磁动力学的示踪物. 为了避免铁朊粒子间过大的相互作用③，可以根据需要用去铁朊(apoferritin，是去掉中间的铁化合物的空蛋白质壳)和铁朊混合起来. 实验中用了微型的 SQUID 陡度计及磁强计，能接近由量子力学所容许的灵敏度上限. 在实验中测量和频率有关的磁化率$\chi(\omega)$及磁噪声 $S(\omega)$. 未抵消的磁矩在随 $\boldsymbol{l}$ 振荡时有磁化强度的关联函数

$$S(\tau)=\langle M(t)M(t+\tau)\rangle = M_0^2\cos(\omega_{res}\tau), \tag{6.10.4}$$

此处 M_0 是未抵消的磁矩的大小，ω_{res}是共振角频率，它的 Fourier 变换正是测量的磁噪声：

$$S(\omega)=\pi M_0^2\delta(\omega-\omega_{res}). \tag{6.10.5}$$

测得的 $S(\omega)$和$\chi(\omega)$分别示于图 6.27(a)，(b). 在实验中用去铁朊稀释 1000∶1，温度 29.7mK，共振频率为 9.4×10^5 Hz，S 与χ共振频率稍有不同是由于杂散磁场的影响. 频率对磁场是非常灵敏的，因此如果稀释得少一些，共振频率就会大得逃出测量极限. $S(\omega)$和$\chi''(\omega)$

---

① 在电磁单位(emu)中 $\boldsymbol{M}$ 的单位是 $erg/G\cdot cm^3$. 在 SI 制中 $\boldsymbol{M}$ 的单位与 $\boldsymbol{H}$ 同，即 $A\cdot m^{-1}$. 换算关系是 $1emu=10^3A\cdot m^{-1}$.

② $\boldsymbol{m}$ 的振荡是可以测量的. Néel 矢量 $\boldsymbol{l}$ 和探测器是没有耦合的. 因此要通过 $\boldsymbol{m}$ 的振荡推知 $\boldsymbol{l}$ 的振荡.

③ N. V. Prokofiev 和 P. C. E. Stamp 指出，环境的自旋产生的拓扑去相干效应足以抑制量子相干.

(χ的虚部)共振频率相同是一个重要的实验. 根据涨落-耗散定理①有

$$\chi''(\omega)=(1-e^{-\hbar\omega/kT})S(\omega)\frac{1}{2\hbar}$$
$$\approx\frac{\omega}{2kT}S(\omega)=\frac{\pi N\omega M_0^2}{2kT}\delta(\omega-\omega_{res})\equiv\chi_{res}\delta(\omega-\omega_{res}),\tag{6.10.6}$$

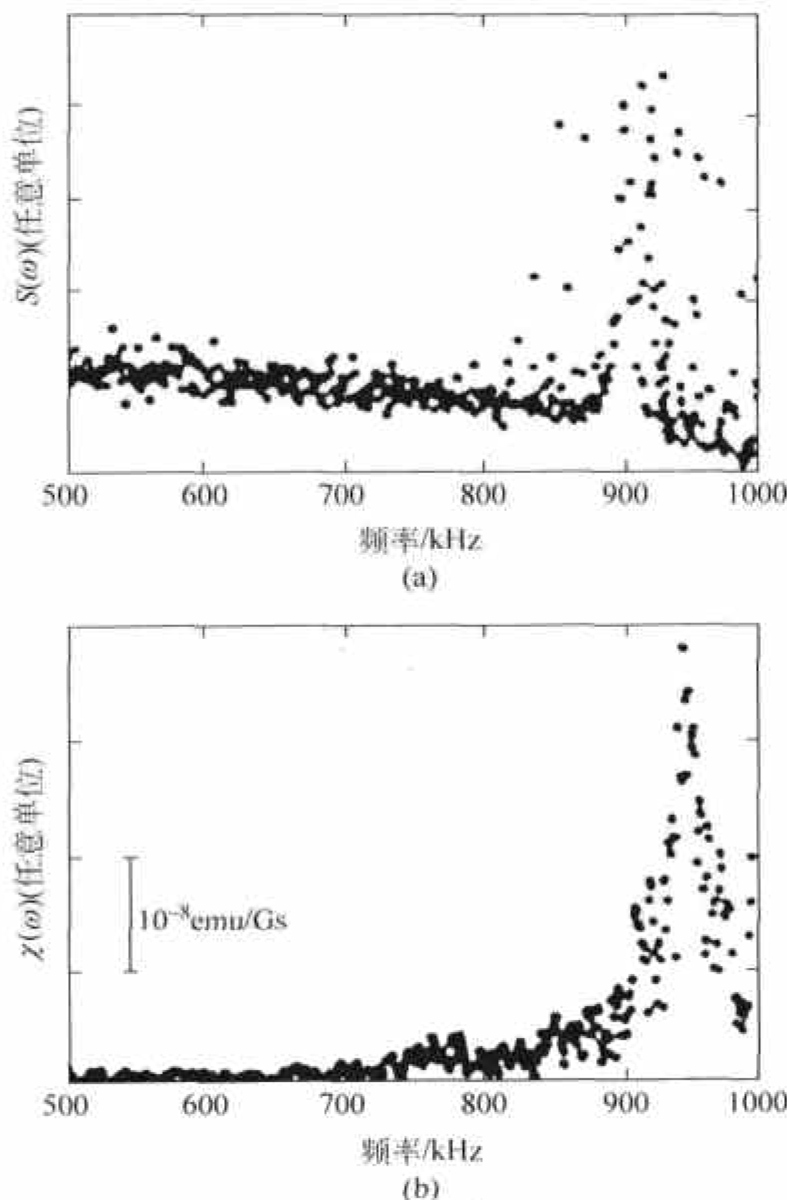


图 6.27 磁噪声谱($B=10^{-5}$G)和磁化率($B=10^{-4}$G). 取自[49]

此处定义了

$$\chi_{res}=\frac{\pi N\omega M_0^2}{2kT},\tag{6.10.7}$$

N 是总铁朊粒子数. 一方面 $S(\omega)$和$\chi''(\omega)$的共振频率相同,且根据式(6.10.7),χ_{res}和温度的关系应以 $T\chi_{res}/S(\omega_{res})$为常数,也为实验证实. 文献[50]进一步测量了共振频率($\nu=\omega/2\pi$)与粒子体积的关系(人造铁朊体积 V 可变,V_0 为天然铁朊体积),证实频率随体积指数下降(图 6.28),正是量子力学所表明的.

对 D. D. Awshalom 的研究有若干步同意见的,有 N. V. Prokofiev 和 P. C. E. Stamp[52],A. Garg[53],H. B. Braun 和 D. Loss[54].

① 请参阅本书 8.7 节.

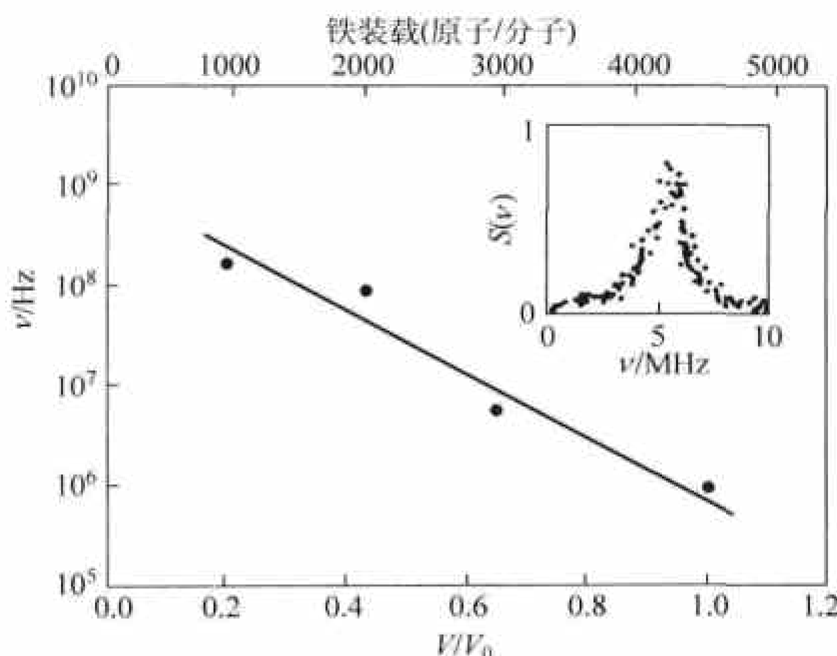


图 6.28　磁噪声共振频率与粒子体积关系. 取自[50]

6.11　磁性大分子的宏观量子现象

一种磁性大分子"Mn_{12}"在1980年初次被化学合成. 它的分子式是 $Mn_{12}O_{12}(CH_3COO)_{16}(H_2O)_4 \cdot 2CH_3COOH \cdot 4H_2O$,分子结构示于图6.29. 大球表示 Mn 离子,外层8个 Mn^{3+}(自旋为2)形成一个铁磁团簇,总自旋为16; 内层4个 Mn^{4+}(自旋为3/2)形成另一个铁磁团簇,总自旋为6. 两套格子自旋相反,形成一个总体的亚铁磁体系,自旋为10. Mn 离子之间交换作用很强,使得 Mn_{12} 成为一个自旋为10的单元. 图中的小球是12个O离子,醋酸根和结晶水都没有画出. 这些大分子结晶于六角晶系格子,易磁化方向是 c 轴. 在晶格中,大分子之间金属离子的最小距离是7Å,因此它们之间的相互作用很弱.

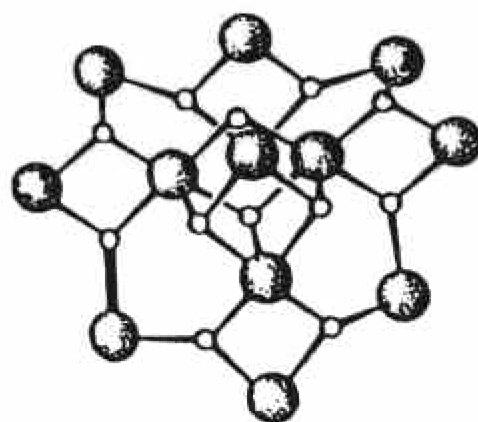


图 6.29　"Mn_{12}"结构图

实验表明存在大的晶体磁各向异性. 磁弛豫测量表明在2.1K以上有单一的弛豫时间 $\tau=\tau_0 e^{-\Delta E/kT}$,而温度再低时表明可能存在量子隧穿.

从微观的角度来研究量子隧穿,这是一个极为理想的系统. 6.10节讨论的单畴磁性颗粒,它们的大小是不均匀的,即势垒高度是有一个分布的,所得到的有关量子隧穿的数据经过平均会抹平. 此处粒子间的相互作用也会造成问题. 这些困难在 Mn_{12} 都不存在. 对 Mn_{12} 的量子隧穿研究,在1996年 J. Friedmann[55], J. Tejada[56], B. Barbara[57] 各实验组都发现了 Mn_{12} 的磁滞回线中有量子阶跃现象(图6.30[57]),陡增和平坦部分相继出现. 由于每个大分子都是等同的,在晶格中取向也相同. 当磁场值达到共振时,每个分子对磁场的反应是一样的,量子隧穿同时发生,因此形成宏观的信号. 令 c 轴方向为 z,外加磁场也在 z 方向,能量对自旋分量的依赖是

$$E = - DS_z^2 - g\mu_z HS_z. \tag{6.11.1}$$

分子自旋为10,因此有21个状态,$S_z=-10,-9,\cdots,0,\cdots,9,10$. 在无外场时有10对能级

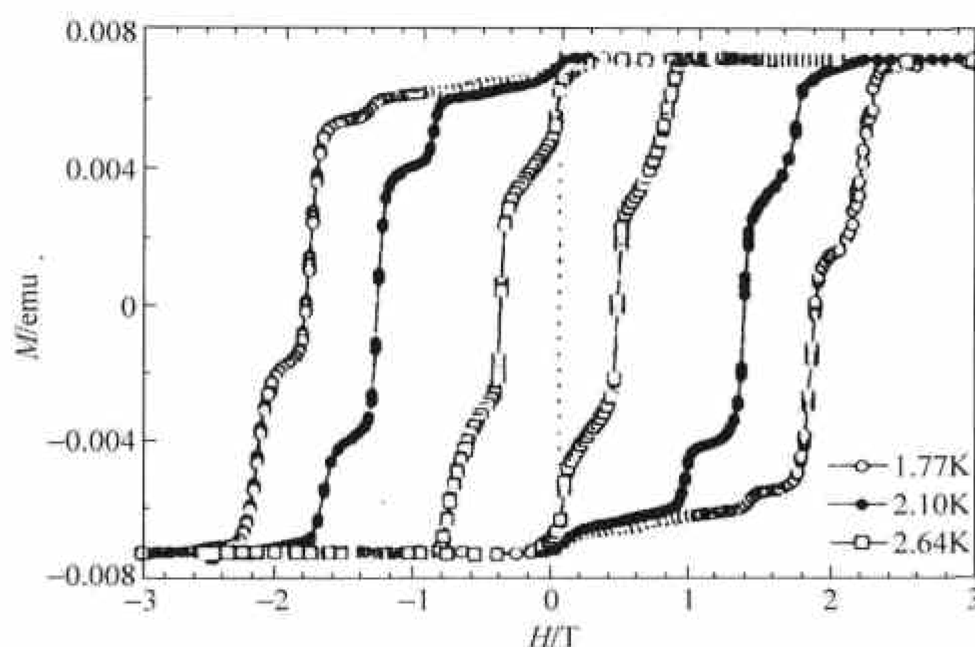


图 6.30 Mn_{12}低温磁滞回线. 取自[57]

是简并的. 图 6.31 画出了这些能级，$|-10\rangle$与$|10\rangle$是最低能量态，但若要跃迁到另一态去(自旋反向)就类似要穿过一个势垒. 在低温时这个跃迁的弛豫时间约为 3 年[58,59]. 在激发态上跃迁要容易得多，因此势协助的隧穿可能性更大. 即分子经热激发到一个激发态，然后从激发态上隧穿势垒，这在低温时会是主要的过程. 在理论上 J. Villain 研究组考虑了隧穿机制[59,60]. 要使隧穿发生，必须有磁各向异性能. 正方晶系要求 Hamilton 量具有 $S_x \to S_y$，$S_y \to -S_x$ 的对称性. 在 Hamilton 量中包括进来使 S_z 不守恒的算符只可能是 $A(S_+^2 + S_-^2)$，但它就是 $A(S^2 - S_z^2)$，仍使 S_z 守恒. 因此只能有

$$H = -DS_z^2 - C(S_+^4 + S_-^4). \tag{6.11.2}$$

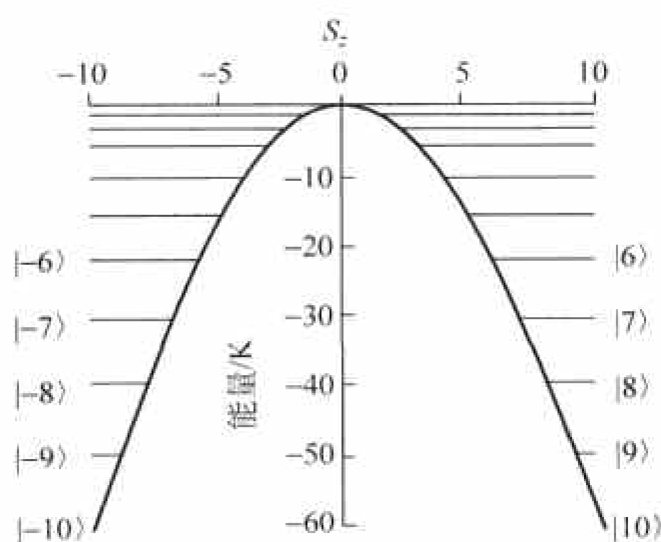


图 6.31 Mn_{12}不同自旋态(无外磁场)

此外还考虑自旋和声子相互作用. 理论要想能解释现有的实验还有不少困难.

磁滞回线的结构与弛豫时间的研究，特别是它们之间的相关性，需要从理论上结与阐明. 当有外场时，S_z 为正值的各能级与 S_z 为负值的各能级要相对移动. 当一个能级$|-m\rangle$与$|m-n\rangle$能量相同时，它们之间能够有共振隧穿. 不计 S_+^4，S_-^4 项，式(6.11.1)给出

$$-Dm^2 + g\mu_B mH = -D(m-n)^2 - g\mu_B(m-n)H,$$

即

$$g\mu_B H_n = nD, \tag{6.11.3}$$

与 m 无关,因此可以将 H 写为 H_n,因它由 n 确定. 这意味着只要一对能级能量相同,必然同时还有其他若干对能级能量相同. 因此

$$H_n = \frac{D}{g\mu_B}n, \tag{6.11.4}$$

$n=0,1,\cdots$ 是给出共振隧穿的条件. 当磁场等于这些值的时候,磁化强度会发生很大变化(阶跃). 由于共振隧穿率显著大于非共振条件,因此弛豫时间也会达到极小. 图 6.32[57] 给出 2.10K 时弛豫时间与 H 的关系. 发生磁化强度阶跃时 H 的值为从 0 到 2.64T 区间等差 $\Delta H=0.44$T,而且只在 H 的方向与初始剩磁方向相反时才有,$\Delta H=0.44$T,给出 $D=0.60$K. 实验研究仍在继续. 在理论上如何解释现有实验结果,仍是一个挑战.

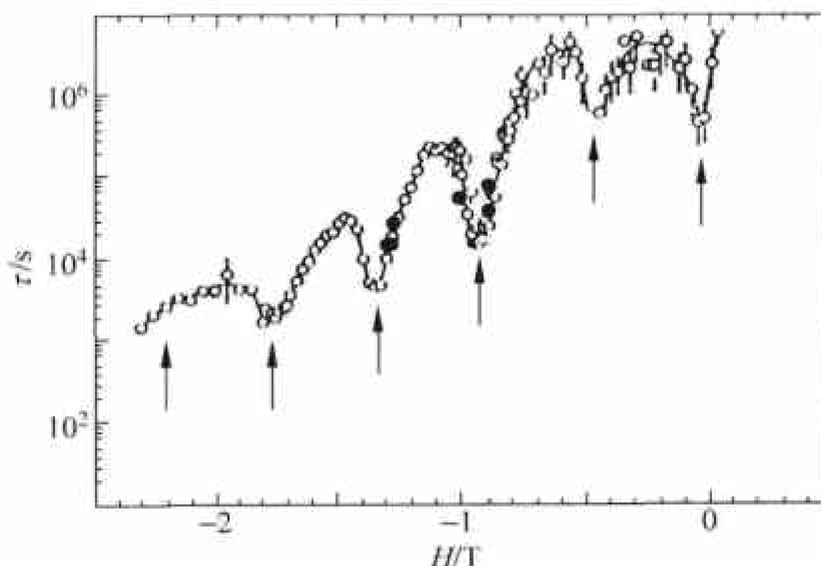


图 6.32 弛豫时间与磁场 H 的关系. 取自[57]

8 个铁原子的集团 Fe_8 在低温下的基态自旋为 $S=10$,表现为磁性粒子. Wernsdorfer 和 Sessoli[61] 发展了测量它的微小的隧穿劈裂的实验方法. 他们发现隧穿劈裂随沿难磁化轴方向外磁场的变化显示明显的振荡,其原因是两个相反缠绕的隧穿路径间的拓扑量子干涉. 这个结果是我们在 6.8.3 节讨论的自旋的拓扑相的明证.

要处理自旋为 10 的体系,自旋相干态路径积分的方法可能不合适. 在这个方法中,自旋被当作经典力学量. 实际上 $[\phi, S_z]=\mathrm{i}$ 被 $s[\phi,\cos\theta]=\mathrm{i}$ 所取代,此处 s 是常数. 如果我们要计算 $[S_x, S_y]$,此处 $S_x=s\sin\theta\cos\phi$, $S_y=s\sin\theta\sin\phi$,就得到

$$[S_x, S_y] = \mathrm{i}S_z + O(1/s^3). \tag{6.11.5}$$

结果意味着方法对于大的 s 值适用. Zaslavskii 及合作者[62] 发展的势描述方法从自旋粒子的 Schrödinger 方程出发,自旋—坐标的对应是精确的,其适用性与自旋的大小无关. 这个方法被 E. M. Chudnovsky 和 D. A. Garanin[63] 和梁九卿等[64] 用于磁隧穿问题. 他们的研究导致和 Wernsdorfer 及 Sessoli 实验符合的结果.

6.12 自旋奇偶效应的量子力学基础

6.8 节中讨论的自旋奇偶效应仅考虑到单个自旋,在推导中用了自旋相干态路径积分. 这个方法只适用于大自旋,例如单畴铁磁或反铁磁颗粒,但研究工作的进展已经遇到 Mn_{12},

其自旋仅为10. 在单畴颗粒中也需要假设交换作用很强，以致可以把它们当作单个的大自旋处理. 从量子力学的基础出发来考查自旋奇偶效应，李伯臧和蒲富恪发现这个效应实际上是对称性的选择定则，且关系是很直接的[65,66].

考虑绕 z 轴 M 重旋转不变性. 它意味着系统的 Hamilton 量 $\hat{H}$ 和旋转算符 $\exp\left(\mathrm{i}\frac{2\pi}{M}\hat{S}_z\right)$ 对易. 因此有

$$\exp(-\mathrm{i}\hat{H}t)=\exp\left(-\mathrm{i}\frac{2\pi}{M}\hat{S}_z\right)\exp(-\mathrm{i}\hat{H}t)\exp\left(\mathrm{i}\frac{2\pi}{M}\hat{S}_z\right). \tag{6.12.1}$$

将此式用于跃迁振幅，有

$$\begin{aligned}\langle m'\mid\exp(-\mathrm{i}\hat{H}t)\mid m\rangle &= \left\langle m'\middle|\exp\left(-\mathrm{i}\frac{2\pi}{M}\hat{S}_z\right)\exp(-\mathrm{i}\hat{H}t)\exp\left(\mathrm{i}\frac{2\pi}{M}\hat{S}_z\right)\middle|m\right\rangle\\ &=\exp\left[\mathrm{i}\frac{2\pi}{M}(m'-m)\right]\langle m'\mid\exp(-\mathrm{i}\hat{H}t)\mid m\rangle,\end{aligned}\tag{6.12.2}$$

其中 $|m\rangle$ 和 $|m'\rangle$ 是 $\hat{S}_z$ 的本征态，相应本征值 m 和 m'，有 $m,m'=-S,-S+1,\cdots,S$. 从此便直接得到

$$m'-m\neq 0(\mathrm{mod}\ M)\Rightarrow\langle m'\mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}\mid m\rangle=0. \tag{6.12.3}$$

令 $m'=-S, m=S$，便有

$$S\neq 0\left(\mathrm{mod}\ \frac{M}{2}\right)\Rightarrow\langle -S\mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}\mid S\rangle=0, \tag{6.12.4}$$

这便是自旋奇偶效应.

以上的考虑可以推广到 N 个自旋系统，以 $\hat{S}_\alpha=(\hat{S}_\alpha^x,\hat{S}_\alpha^y,\hat{S}_\alpha^z)$ 代表第 α 个自旋的自旋算符，其分量用上标表示，以 S_α 代表自旋量子数，以 $|m_\alpha\rangle$ 代表 $\hat{S}_\alpha^z$ 的本征态，相应本征值 m_α，有 $m_\alpha=-S_\alpha,-S_{\alpha+1},\cdots,S_\alpha$. 体系总自旋的 z 分量 $\sum\limits_\alpha \hat{S}_\alpha^z$ 的本征态是张量积

$$|\{m_\alpha\}\rangle=|m_1\rangle|m_2\rangle\cdots|m_N\rangle, \tag{6.12.5}$$

相应本征值为 $\sum\limits_\alpha m_\alpha$. 式(6.12.3)即可以直接推广为

$$\sum_\alpha(m_\alpha-m'_\alpha)\neq 0(\mathrm{mod}M)\Rightarrow\langle\{m'_\alpha\}\mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}\mid\{m_\alpha\}\rangle=0. \tag{6.12.6}$$

式(6.12.3)、式(6.12.6)便是以量子力学选择定则出现的源于 M 重轴旋转对称性的自旋奇偶效应. 对单个、多个自旋体系均适用，且不受大自旋限制.

以 $\hat{T}$ 表示时间反演算符，它是一个反线性、反幺正算符①，满足以下关系：

$$\hat{T}\mathrm{i}\hat{T}^{-1}=-\mathrm{i}, \tag{6.12.7a}$$

$$\hat{T}\hat{S}T^{-1}=-\hat{S}, \tag{6.12.7b}$$

$$\hat{T}^2=(-1)^{2S}. \tag{6.12.7c}$$

令 $|\psi^T\rangle$ 为 $|\psi\rangle$ 的时间反演态，

$$|\psi^T\rangle=\hat{T}|\psi\rangle, \tag{6.12.8}$$

① 参阅文献[16].

则有
$$\langle \psi^T | \varphi^T \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle. \tag{6.12.9}$$
系统具有时间反演不变性,因此有
$$e^{-i\hat{H}t} = \hat{T} e^{i\hat{H}t} \hat{T}^{-1}, \tag{6.12.10}$$
在以上用了式(6.12.7a).式(6.12.10)给出
$$\langle m' \mid e^{-i\hat{H}t} \mid m \rangle = \langle m' \mid \hat{T} e^{i\hat{H}t} T^{-1} \mid m \rangle. \tag{6.12.11}$$
令
$$\mid \mu \rangle = e^{i\hat{H}t} \hat{T}^{-1} \mid m \rangle, \tag{6.12.12}$$
因此有
$$\langle m' \mid e^{-i\hat{H}t} \mid m \rangle = \langle m' \mid \hat{T} \mid \mu \rangle = \langle \mu \mid \hat{T}^{-1} m' \rangle. \tag{6.12.13}$$
以上用了式(6.12.10).进一步推证需要$\hat{T}$及$\hat{T}^{-1}$作用于$\hat{S}_z$本征态$|m\rangle$的结果.暂先假定$|m\rangle$是态空间的基准态[①],即它们满足
$$\hat{S}_z \mid m \rangle = m \mid m \rangle, \tag{6.12.14}$$
$$\hat{S}_\pm \mid m \rangle = [(S \mp m)(S \pm m + 1)]^{1/2} \mid m \pm 1 \rangle. \tag{6.12.15}$$
由于
$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i \hat{S}_y \tag{6.12.16}$$
有
$$\hat{T} \hat{S}_\pm \hat{T}^{-1} = -\hat{S}_\mp, \quad \hat{T} \hat{S}_z \hat{T}^{-1} = -\hat{S}_z; \tag{6.12.17}$$
此处用了式(6.12.7a,b).因此用式(6.12.17)、式(6.12.14)、式(6.12.15)可得
$$\hat{S}_z \hat{T} \mid m \rangle = -m \hat{T} \mid m \rangle, \tag{6.12.18}$$
$$\hat{S}_\pm \hat{T} \mid m \rangle = -[(S \pm m)(S \mp m + 1)]^{1/2} \hat{T} \mid m \mp 1 \rangle. \tag{6.12.19}$$
由于$\hat{S}_z$每个本征值都是非简并的,故比较式(6.12.14)与式(6.12.18)有
$$\hat{T} \mid m \rangle = \theta_m \mid -m \rangle. \tag{6.12.20}$$
其中θ_m是依赖于m的相因子.将式(6.12.20)代入式(6.12.19)得
$$\theta_m = (-1)^{S-m} \theta, \tag{6.12.21}$$
其中
$$\theta \equiv \theta_{-S};$$
它给出了不同m值的相因子间的关系.于是式(6.12.20)可以写作
$$\hat{T} \mid m \rangle = (-1)^{S-m} \theta \mid -m \rangle. \tag{6.12.22}$$
再用$\hat{T}$作用于上式左右方,得
$$\theta^2 = 1, \quad 即\ \theta = \pm 1. \tag{6.12.23}$$
在文献[66]中还证明了$\theta=1$,但为了推演选择规则有式(6.12.23)即已足够.式(6.12.22)给出

① 如它们不属基准态,则固定式(6.12.14),而式(6.12.15)前会出现相因子.以下可以看到这个假定是不必要的.

$$\hat{T}\,|-m\rangle = (-1)^{S+m}\theta\,|\,m\rangle.$$

以$\hat{T}^{-1}$作用于等号左右方，再用$(-1)^{S+m}\theta$作用于双方.考虑到$(-1)^{2S+2m}=1$，有

$$\hat{T}^{-1}\,|\,m\rangle = (-1)^{S+m}\theta\,|-m\rangle. \tag{6.12.24}$$

用式(6.12.24)，则式(6.12.12)给出

$$|\,\mu\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}T^{-1}\,|\,m\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t}(-1)^{S+m}\theta\,|-m\rangle,$$

亦即

$$\langle\mu\,| = \langle -m\,|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}(-1)^{S+m}\theta \tag{6.12.25}$$

现在就可以继续式(6.2.13)的推演.用式(6.12.24)、式(6.12.25)得

$$\begin{aligned}\langle m'\,|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}\,|\,m\rangle &= \langle\mu\,|\,(-1)^{S+m'}\theta\,|-m'\rangle\\ &= \langle -m\,|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}(-1)^{2S+m+m'}\,|-m'\rangle.\end{aligned}$$

令$m'=-m$，上式变为

$$\langle -m\,|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}\,|\,m\rangle = (-1)^{2S}\langle -m\,|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}\,|\,m\rangle. \tag{6.12.26}$$

因此，

$$S = 半整数 \Rightarrow \langle -m\,|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t}\,|\,m\rangle = 0. \tag{6.12.27}$$

结果容易推广到多自旋系统.由于式(6.12.27)的成立和在跃迁矩阵元前乘一个相因子所得结论相同，因此$|m\rangle$为态空间基准态的假定是不必要的.

在6.8节讨论了在无磁场情况下拓扑淬灭效应和Kramers简并等价.以上的讨论表明，对半整数自旋从$|S\rangle$到$|-S\rangle$的跃迁被禁戒是严格的时间反演不变的结果.一般情况下$|S\rangle$和$|-S\rangle$并非Hamilton量的本征态，因此$|S\rangle$到$|-S\rangle$的禁戒和H本征态的二重简并并没有关系.在严格的量子力学意义上，选择定则的成立与H本征态二重简并都是时间反演不变性的后果，而二者之间没有直接联系.在6.8节讨论中，半整数自旋体系在双阱势情况下基态为二重简并，而这简并的两个态的自旋平均值正是$-S$与S.在半径典近似下平均值与本征值就不予以区别了.

Haldane猜想和磁量子相干的自旋奇偶效应源于Wess-Zumino项.它的拓扑效应不仅在时间反演不变成立时有所展现，在时间反演不变不再成立时(有磁场)，拓扑效应也表现在隧穿率随磁场的振荡上.时间反演不变性之所以区别整数和半整数自旋是基于$\hat{T}^2=(-1)^{2S}$这一性质.不论体系是否有Wess-Zumino项，选择规则都会成立.这二者是彼此独立的，但有时会有交叉.

参考文献

[1] Lifshitz E M, Pitaevski L P. Statistical Physics. part2. Oxford: Pergamon Press, 1980.

[2] Schrieffer J R. Theory of Superconductivity. Reading: Benjamin/aCummings, 1964.

[3] Gorkov L P. Sov Phys JETP, 1959, 9: 1364.

[4] Feynman R P, Leighton R B, Sands M. Feynman Lectures on Physics. vol Ⅲ. Reading: Addison-Wesley, 1965.

[5] Josephson B D. Phys Lett,1962,1: 251.
[6] Anderson P W. Phys Today,1970,23(11): 23.
[7] Rowell J W. Phys Rev Lett,1963,11: 200.
[8] Jacklevic R C,Lambe J,Silver A H,Mercereau J E. Phys Rev Lett,1964 12: 159; 1964,12: 274.
[9] Kurkijärvi J. Phys Rev, 1972,B 6: 832.
[10] Leggett A J. Macroscopic Quantum Tunneling and Related Effects in Josephson Systems. In: Percolation, Localization and Superconductivity. Goldman M, Wolf SA, eds. New York: Plenum,1984.
[11] Caldeira A O,Leggett A J. Ann Phys(N. Y.),1983,149: 374.
[12] Leggett A J,Chakravarty S. Dorsey A T,Fisher M,Garg A,Zwerger W. Rev Mod Phys,1987,59: 1.
[13] Kramers H A. Physica,1940,7: 284. Kramers H A. Physica,1940,7: 284.
[14] Weiss U. Quantum Dissipative Systems. Singapore: World Scientific,1993.
[15] Feynman R P,Vernon F L Jr. Ann Phys(N. Y.),1963,24: 118.
[16] Schiff L I. Quantum Mechanics. 3rd ed. New York: McGraw Hill,1968.
[17] Ambegaokar V,Eckern U,Schön G. Phys Rev Lett,1982,48: 1745.
[18] Ambegaokar V,Eckern U,Schön G. Phys Rev,1984,B 30: 6419.
[19] Yu L H,Sun C P. Phys Rev,1994,A 49: 592.
[20] Sun C P,Yu L H. Phys Rev,1995,A 51: 1845.
[21] Sun C P,Gao Y B,Dong H F,Zhao S R. Phys Rev,1998,E 57: 3900.
[22] Fujikawa K,Iso S,Sasaki M,Suzuki H. Phys Rev Lett,1992,68,1093.
[23] Jackel L D,et al. Phys Rey Lett,1981,47: 697.
[24] Voss R F,Webb R A. Phys Rev Lett,1981,47: 265.
[25] Washburn S. Webb R A,Voss R F,Farrls S M. Phys Rev Lett,1985,54: 2712.
[26] Martinis J M,Devoret M H,Clarke J. Phys Rev Lett,1985,55: 1543.
[27] Chudnovsky E M,Gunther L. Phys Rev Lett,1988,60: 661.
[28] Chudnovsky E M,Gunther L. Phys Rev,1988,B 37: 9455.
[29] Auerbach A. Interacting Electrons and Quantum Magnetism. New York: Springer,1994.
[30] Klauder J R,Skagerstam B S. Coherent States. Singapore: World Scientific,1985.
[31] Garg A,Kim G H. Phys Rev,1992,B 45: 12921.
[32] Loss D,DiVincenzo D P,Grinstein G. Phys Rev Lett,1992,69: 3232.
[33] von Delft J,Henley C L. Phys Rev Lett,1992,69: 3236.
[34] Messiah A. Quantum Mechanics. Vol. 2. Amsterdam: North Holland,1962.
[35] Garg A. Europhys Lett,22,205,1993.
[36] Chudnovsky E M,DiVincenzo D P. Phys Rev,1993,B 48: 10548.
[37] Garg A. Phys Rev,1995,B 51: 15161.
[38] Gunther L,Barbara B. Quantum Tunneling of Magnetism. Dordrecht: Kluwer 1995.
[39] Wang X B,Pu F C. J Phys Cond Matter,1997,9: 693.
[40] Lü R,Zhang P,Zhu J-L,Chang L. Phys Rev,1997,B 56: 10993; Lü R,Zhu J-L,Chen X,Chang L. Eur Phys J,1998,B 4: 223; Zhu J-L,Lü R,Wang X B,Chen X,Chang L,Pu F C. Eur Phys J,1998,B 4: 223; Lü R, Zhu J-L,Wang X B,Cahng L. Phys Rev,1998,B 58: 8542; Lü R,Zhu J-L,Wu J,Wang X B,Chang L. Phys Rev,1999,B 60: 3435.
[41] Lu R, Zhu J-L,Zhou Y,Gu B-L. Phys Rev,2000,B 62: 11661; Zhou Y,Lu R,Zhu J-L,Chang L. Phys Rev,2001,B. 63: 054429.
[42] Chudnovsky E M. J Magn Magn Matter,1995,140-144: 1821.
[43] Barbara B,Chudnovsky E M. Phys Lett,1990,A 145: 205.

[44] Krive I V, Zaslavskii D B. J Phys Cond Matter, 1990, 2: 9457.
[45] Garg A, Kim G-H. Phys Rev Lett, 1989, 63: 2512; Garg A, Kim G H. Phys Rev, 1991, B 43: 712; Garg A. Phys Rev Lett, 1993, 70: 1541.
[46] Barbara B, et al. J Appl Phys, 1993, 73: 6703.
[47] Tejada J, Zhang X X, Chudnovsky E M. Phys Rev, 1995, B 47: 14977.
[48] Tejada J, Zhang X X. J Magn Magn Matter, 1995, 140-144: 1815.
[49] Awshalom D D, DiVincenzo D P, Smyth J F. Science, 1992, 258: 414.
[50] Gider S, Awshalom D D, Douglas T, Mann S, Chaparala M. Science, 1995, 268: 77.
[51] Awshalom D D, Smyth J F, Grinstein G, DiVincenzo D P, Loss D. Phys Rev Lett, 1992, 68: 3092.
[52] Prokofiev N V, Stamp P C E. J Phys Cond Matter, 1993, 5: L663.
[53] Garg A. Phys Rev Lett, 1993, 70: 1541; 1993, 70: 2193; 1993, 71: 4249.
[54] Braun H B, Loss D J. J Appl Phys, 1994, 76: 6177.
[55] Friedmann J R, Sarachik M P, Tejada J, Ziolo R. Phys Rev Lett, 1996, 75: 537.
[56] Hernandez J M, Zhang X X, Luiz F, Bartelomé J, Tejada J. Ziolok Europhys Lett, 1996, 35: 301.
[57] Thomas L, Lionti F, Ballou R, Gatteschi D, Sessoli R, Barbara B. Nature, 1996, 383: 145.
[58] Paulsen C, Park J G. In: Quantum Tunneling of Magnetism. Gunther L, barbara B. eds. Dordrecht: Kluwer, 1995.
[59] Politi P, Rittori A, Hartmann-Boutron F, Villain J. Phys Rev Lett, 1995, 75: 537.
[60] Hartmann-Boutron F, Politi P, Villain J. Int J Mod Phys, 1996, B 10: 2577.
[61] Wernsdofer W, Sessoli R. Science, 1999, 284: 133.
[62] Zaslavskii O B. Phys Lett, 1990, A 145: 471; Phys Rev, 1990, B 42: 992; Uyanov V V, Zaslavskii O B. Phys Rep, 1992, 216: 179.
[63] Chudnovsky E M, Garanin D A. Phys Rev Lett, 1997, 79: 4469.
[64] Liang J Q, Müller-Kirsten H J W, Park D K, Pu F C. Phys Rev, 2000, B 61: 8856.
Jin Y-H, Nie Y-H, Li Z-J, Liang J-Q, Pu F-Q. Mod Phys Lett, 2000, B 14: 809.
[65] Li B, Wu J, Zhong W, Pu F. Science in China (series A), 1998, 41: 301.
[66] Li B, Pu F. Science inChina(series A), 1998, 41: 983.

第7章 量子体系的拓扑相因子

在第6章中讨论的自旋量子隧穿有一个区别整数与半整数自旋的现象，它起源于一个Wess-Zumino项，该现象被称为拓扑淬灭. 在研究一维链自旋波时，发现铁磁自旋链激发态有能隙，反铁磁链没有，即存在无质量的准粒子. 一维磁链对量子涨落不稳定，在波矢 $\boldsymbol{k}$ 趋于零时它有"红外发散"，这将在本章7.1节中讨论.

在研究一维量子反铁磁链时，又出现了Wess-Zumino项. Haldane作了一个猜测：若链上自旋是整数，则激发有能隙，对半整数自旋，激发是无质量的. 这被称为Haldane猜想，它和拓扑淬灭是遥相呼应的：Wess-Zumino项区别整数和半整数自旋. 从另一个角度考虑，一维反铁磁链的极限等价于非线性 σ 模型，这个模型有对称自发破缺，出现Goldstone Bose子，即无质量粒子. 这个等价意味着一维反铁磁链应有无质量激发，与自旋值无关.

一维反铁磁链会有对称自发破缺吗？不同的研究给出相同的结论：一维反铁磁链没有长程序，而在对称自发破缺时它是会出现的. 这和Coleman定理相一致. 定理指出，当有红外发散存在时，对称自发破缺不能发生，激发一定是有能隙的. 那么半整数自旋链的无能隙激发又从何而来？要找出整数自旋和半整数自旋间的差别. 最后答案是在大自旋极限下它们映射到不同的场论，一个有Wess-Zumino项，一个没有. 在非整数自旋情况下这个拓扑项的非微扰效应抑制了能隙的产生. 因此非整数自旋链的无质量激发和对称自发破缺无关，它不是Goldstone玻色子. 在7.2节和7.3节中讨论这些问题.

Lieb-Schultz-Mattis定理给出整数自旋和半整数自旋的区别. 它指出满足平移不变性和自旋空间转动不变性的半整数自旋链有无能隙激发，或者有相反宇称的简并基态. 这点在7.4节中讨论. 拓扑项的意义将在7.5节中简单讨论.

拓扑项的另一个重要表现是在非Abel规范场的 Θ 真空问题中，7.6节介绍这个问题.

物理学的基础问题常常会贯穿在不同分支的许多研究问题中，把看来很不同的问题联系起来. 对一个问题的理解往往会对其他的问题有所启发. 本章涉及很多问题，有的超出了量子力学的范围. 为了举例说明物理学的统一性，在此仍对它们作了简单介绍.

7.1 Heisenberg模型的自旋波理论

固体格点自旋间的相互作用可以导致自旋系统的集体激发，这种集体激发称为自旋波. 作为体系基态，所有自旋取相同方向的固体是铁磁体. 在亚铁磁体或反铁磁体中，晶格分为

两套相间的子格，每个子格上的自旋取一定方向．两套子格上的总自旋大小相等、方向相反的是反铁磁体，子格总自旋大小不等的是亚铁磁．描述晶格自旋体系的是 Heisenberg 模型．令 $\boldsymbol{S}_i$ 为第 i 个离子的自旋算符，J_{ij} 代表交换积分，体系的 Hamilton 量是

$$H = -\sum_{i,j(i\neq j)} J_{ij}\boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j. \tag{7.1.1}$$

求和对所有离子对进行．可以将 Hamilton 量(7.1.1)唯象地引入．而自旋 1/2 的多电子体系的相互作用能正好给出这个 Hamilton 量．我们先来解释交换积分的意义．在多电子体系的 Hartree-Fock 理论中，多电子波函数可以由单电子波函数的乘积展开．相同自旋的多个电子的波函数由 Slater 行列式表示：

$$\psi_{ij\cdots}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots) = \begin{vmatrix} \varphi_1(\boldsymbol{r}_1) & \varphi_1(\boldsymbol{r}_2) & \cdots \\ \varphi_2(\boldsymbol{r}_1) & \varphi_2(\boldsymbol{r}_2) & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix}, \tag{7.1.2}$$

此处 $\varphi_i(\boldsymbol{r}_\alpha)$ 中的 i 是状态指标，α 是电子指标．在式中交换任意两个电子的反对称性是明显的．在计算电子相互作用能量时，有一部分称为交换能：

$$E_0 = -\frac{e^2}{2}\sum_{i,j}{}' \int \frac{\varphi_j^*(\boldsymbol{r}_1)\varphi_j(\boldsymbol{r}_2)\varphi_i^*(\boldsymbol{r}_2)\varphi_i(\boldsymbol{r}_1)}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2 + \cdots. \tag{7.1.3}$$

求和号上的一撇提示 $i\neq j$．交换能只在相同自旋电子间存在．我们将一个电子的自旋反向，体系就失去这个电子和其他 $N-1$ 个电子间的交换能．能量的差别是

$$E_1 - E_0 = \frac{e^2}{2}\sum_{j}{}' \int \frac{\varphi_j^*(\boldsymbol{r}_1)\varphi_j(\boldsymbol{r}_2)\varphi_i^*(\boldsymbol{r}_2)\varphi_i(\boldsymbol{r}_1)}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2 \equiv \frac{1}{2}\sum_{j}{}' J_{ij}. \tag{7.1.4}$$

上式定义了 J_{ij}，即 Hamilton 量式(7.1.1)中的交换积分．下面来计算交换能量式(7.1.1)．令 ↑ 及 ↓ 分别代表 $s_z=1/2$ 和 $s_z=-1/2$ 的状态，则两个自旋相同的电子相互作用能是

$$E_{\uparrow\uparrow} = -J_{ij}\langle \uparrow_i \uparrow_j | \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j | \uparrow_i \uparrow_j \rangle.$$

用自旋升降算符 $S^+ = S^x + \mathrm{i}S^y, S^- = S^x - \mathrm{i}S^y$，有

$$S^+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle, \quad S^-|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle,$$

$$S^+|\uparrow\rangle = S^-|\downarrow\rangle = 0,$$

$$\boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j = \frac{1}{2}(S_i^+S_j^- + S_i^-S_j^+) + S_i^z \cdot S_j^z,$$

可以算出

$$E_{\uparrow\uparrow} = -\frac{1}{4}J_{ij}.$$

在式中算符上标代表分量，下标代表离子位置．类似地，有

$$E_{\uparrow\downarrow} = \frac{1}{4}J_{ij}.$$

因此，若 $J>0$，则两个自旋平行能量低；而若 $J<0$，则两个自旋反平行能量低．这两种情况能量差为 $\frac{1}{2}J_{ij}$，故体系有多个电子，所有电子自旋取向相同的状态与将其中一个电子反向的状态的能量差是 $\frac{1}{2}\sum_{j(j\neq i)} J_{ij}$，正与 Hartree-Fock 理论中的计算相同．电子间的交换相互作用可以用 Heisenberg 模型的自旋-自旋相互作用予以重现．交换积分的符号是至关重要的．

如果 $J>0$，平行自旋能量较低，如 $J<0$，则反平行自旋有较低的能量. 由于最近邻间的交换相互作用是主要的，在式(7.1.1)中的对离子对求和可以只在最近邻间进行. 离子 i 有 ν 个最近邻，可以用 $i+\delta$ 标志这些近邻，$\delta=1,2,\cdots,\nu$. 对简单晶格，$J_{i,i+\delta}$ 与 δ 无关，记为 J. 式(7.1.1)就简化为

$$H=-J\sum_{i,\delta}\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_{i+\delta}. \tag{7.1.5}$$

设离子自旋为 s(整数或半整数，单位 $\hbar$). 考虑状态 Φ_0，所有离子自旋的 z 分量都是最大值 s. 第 n 个离子状态记为 $|s\rangle_n$，则有 $\Phi_0=\prod\limits_n|s\rangle_n$. 将式(7.1.5)用自旋算符的分量表示，有

$$H=-J\sum_{\langle ij\rangle}\left[S_i^zS_j^z+\frac{1}{2}(S_i^+S_j^-+S_i^-S_j^+)\right], \tag{7.1.6}$$

$\langle ij\rangle$ 代表最近邻 i,j. 将 H 作用于 Φ_0，得

$$H\Phi_0=-J\sum_{i,j=i+\delta}s^2\Phi_0=-J\nu Ns^2\Phi_0\equiv E_0\Phi_0. \tag{7.1.7}$$

在计算过程中，用到 $S^+|s\rangle=0$ 和 $\boldsymbol{s}_i$ 与 $\boldsymbol{s}_j$ 分量对易($i\neq j$). 式(7.1.7)中 ν 是最近邻数，N 是离子总数. 从式(7.1.7)可见，Φ_0 是 H 的本征态，如果 $J>0$，它是基态，这是铁磁基态. 在 Φ_0 的基础上将第 m 个离子的自旋 z 分量减小1单位，得到的状态记为 Φ_m：

$$\Phi_m=S_m^-\prod_n|s\rangle_n. \tag{7.1.8}$$

将 H 作用于 Φ_m，得

$$H\Phi_m=-J\sum_{\langle i,j\rangle}\left[S_i^zS_j^zS_m^-+\frac{1}{2}(S_i^+S_j^-S_m^-+S_i^-S_j^+S_m^-)\right]\Phi_0 \tag{7.1.9}$$

用对易关系

$$\left.\begin{aligned}[S_m^+,S_n^-]&=2S_m^z\delta_{mn},\\ [S_m^-,S_n^z]&=S_m^-\delta_{mn},\\ [S_m^+,S_n^z]&=-S_m^+\delta_{mn}.\end{aligned}\right\} \tag{7.1.10}$$

可以将式(7.1.9)简化为[①]

$$H\Phi_m=E_0\Phi_m+2Js\sum_\delta(\Phi_m-\Phi_{m+\delta}). \tag{7.1.11}$$

因此，Φ_m 不是 H 的本征态. H 的本征态可由 Φ_m 的线性组合构成，而由平移不变性要求出发，它应是

$$\Phi=\sum_m e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_m}\Phi_m, \tag{7.1.12}$$

此处 $\boldsymbol{k}$ 是 Brillouin 区中 N 个矢量之一，$\boldsymbol{R}_m$ 是离子 m 的矢径. 用 H 作用于 Φ 给出

$$\begin{aligned}H\Phi&=E_0\Phi+2Js\nu\Phi_m-2Js\sum_{m,\delta}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_m}\Phi_{m+\delta}\\ &=[E_0+2J\nu s(1-\gamma_k)]\Phi,\end{aligned} \tag{7.1.13}$$

其中

$$\gamma_k=\frac{1}{\nu}\sum_\delta e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_\delta}. \tag{7.1.14}$$

---

① E_0 是 Φ_0 的本征值，见式(7.1.7)

式(7.1.13)表明,Φ(式(7.1.12))是 H 的本征态,相应的本征值是

$$E_k = E_0 + 2J\nu s(1-\gamma_k). \tag{7.1.15}$$

激发态 Φ 是集体激发模式,一个原子的激发能量可以通过自旋-自旋相互作用传递给其他原子,使激发能量以波的形式传播于整个晶格.这类激发称自旋波.一维链上波数为 k 的自旋波示于图 7.1,其中(a)是透视图,(b)是俯视图,(c)给出三个相邻格点处自旋的关系.要获得低激发态的色散关系,将式(7.1.15)对 $\boldsymbol{k}$(小量)展开,得

$$E_k = E_0 + Js\sum_{\delta}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_\delta)^2. \tag{7.1.16}$$

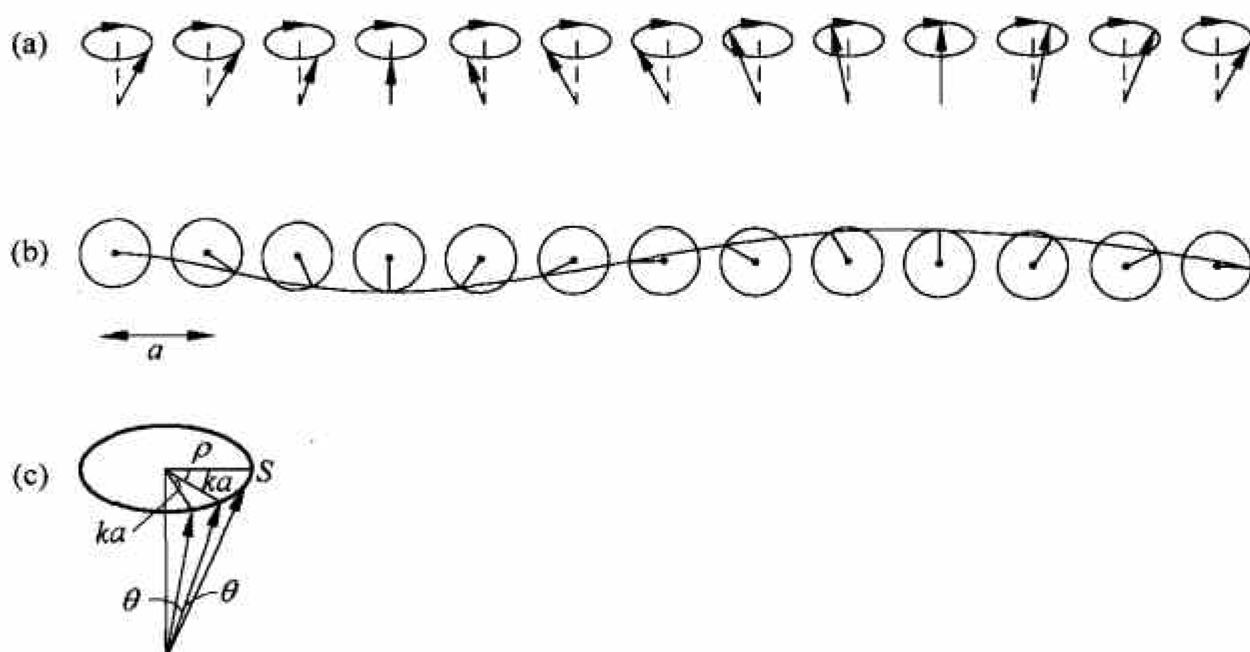


图 7.1 一维链上的自旋波

自旋波激发进行量子化后,其量子称磁振子(magnon).在基态所有格点的自旋都是 $S_z=s$(最大值).令 n_i 代表第 i 个格点自旋偏离最大值的数量,$n_i=s-s_i^z$.在粒子占有数表示中,状态由 $|n_1,n_2,\cdots,n_i,\cdots,n_N\rangle$ 表示.基态是 $|0,0,\cdots,0\rangle$.这样,引入粒子数产生与消灭算符 $a_j^\dagger$,a_j,并令 $n_j=a_j^\dagger a_j$,则 S_j^- 就和 $a_j^\dagger$ 联系起来:增加 n_j1 单位即减少 S_z1 单位.S_j^+ 就和 a_j 联系起来.用对易关系式(7.1.10)可以得到自旋升降算符的作用

$$\left.\begin{aligned} S^+|n\rangle &= \sqrt{2s+1-n}\sqrt{n}\,|n-1\rangle, \\ S^-|n\rangle &= \sqrt{2s-n}\,\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle, \\ S^z|n\rangle &= (s-n)|n\rangle. \end{aligned}\right\} \tag{7.1.17}$$

与算符 a 和 $a^\dagger$ 的作用相比:

$$\left.\begin{aligned} a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle, \\ a|n\rangle &= \sqrt{n}\,|n-1\rangle, \end{aligned}\right\} \tag{7.1.18}$$

就得到两组算符间的联系:

$$\left.\begin{aligned} S^+ &= \sqrt{2s-a^\dagger a}\,a, \\ S^- &= a^\dagger\sqrt{2s-a^\dagger a}, \\ S^z &= s-a^\dagger a. \end{aligned}\right\} \tag{7.1.19}$$

式(7.1.19)称为 Holstein-Primakoff 变换.以上的 a,$a^\dagger$ 算符是定义在格点上的,例如 a_i,$a_j^\dagger$.

自旋波是集体激发. 定义与波矢有关的算符 $a_k, a_k^\dagger$①:

$$
\begin{aligned}
a_j^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{ik\cdot R_j} a_k^\dagger, \\
a_j &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k e^{-ik\cdot R_j} a_k.
\end{aligned}
\tag{7.1.20}
$$

a_k 与 $a_k^\dagger$ 是消灭和产生波矢为 $\boldsymbol{k}$ 的磁振子的算符. 它们满足以下对易关系:

$$
\left.\begin{aligned}
[a_k, a_{k'}^\dagger] &= \delta_{k,k'}, \\
[a_k, a_{k'}] &= [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger] = 0.
\end{aligned}\right\}
\tag{7.1.21}
$$

元激发只在基态附近(n_i 小)才有意义. 关系式(7.1.19)中根号下的算符在 n 小的情况下可以作为小量展开. 略去高阶项后, S^+ 含 $a_k, a_k a_{k'}^\dagger a_{k''}$; S^- 含 $a_k^\dagger, a_k^\dagger a_{k'}^\dagger a_{k''}$. 式(7.1.6)可以写成二次量子化形式:

$$
\begin{aligned}
H = E_0 &+ \sum_k 2J\nu s(1-\gamma_k)a_k^\dagger a_k \\
&+ \frac{\nu J}{2N}\sum_{k,\kappa,k'}(\gamma_{k-\kappa} + \gamma_{k'} - 2\gamma_{k-\kappa-k'})a_{k-\kappa}^\dagger a_{k'+\kappa}^\dagger a_{k'} a_k \\
&+ \cdots.
\end{aligned}
\tag{7.1.22}
$$

式中右方第二项是磁振子激发, 波矢为 $\boldsymbol{k}$ 的磁振子能量为

$$
\hbar\omega_k = 2J\nu s(1-\gamma_k). \tag{7.1.23}
$$

右方第三项代表一对磁振子的相互作用, 在过程中有动量 κ 交换. 在写出式(7.1.22)中用了 $\gamma_k = \gamma_{-k}$.

若 $J<0$, 相邻自旋反向能使相互作用能量降低. 取两套彼此相间的子晶格 a 与 b, 每个子格中的自旋一致. 若子格 a 各点自旋为 $s^z = s$, 子格 b 各点自旋为 $s^z = -s$, 且两套子格格点数相同, 这个状态称 Néel 态②. 和铁磁情况类比, 会猜想 Néel 态是反铁磁基态. 但实际上这个态并不是 H(式(7.1.6))的本征态. 原因是: i 和 j 作为最近邻, 必须分别属于两个不同的子格. 若 i 处自旋为 $s^z = s$, j 处则必为 $s^z = -s$. 算符作用于 $|s\rangle_i|-s\rangle_j$ 上, $S_i^+S_j^-$ 给出 0, 而 $S_i^-S_j^+$ 给出 $\text{const}|s-1\rangle_i|-s+1\rangle_j$, 而不是 $\text{const}|s\rangle_i|-s\rangle_j$. 以 Néel 态作为参考态

$$
|0,0,\cdots,0\rangle, \tag{7.1.24}
$$

任意态是

$$
|n_1, n_2, \cdots, n_N\rangle, \tag{7.1.25}
$$

其定义是, 在子格 a 中 $n_i = s - s_i$(因此 Néel 态 $s_i = s$ 相当于 $n_i = 0$), 子格 b 中 $n_j = s_j - (-s) = s_j + s$(因此 Néel 态 $s_j = -s$, 也相当于 $n_j = 0$). 这种定义保证对所有态 $n_i, n_j \geqslant 0$. 由于两套子格存在, 以及 n_i, n_j 的定义, 可以看到

$$
\left.\begin{aligned}
&S_{a_i}^+ \text{ 相当于 } a_i, \quad S_{a_i}^- \text{ 相当于 } a_i^\dagger, \\
&S_{b_j}^+ \text{ 相当于 } b_j^\dagger, \quad S_{b_j}^- \text{ 相当于 } b_j.
\end{aligned}\right\}
\tag{7.1.26}
$$

因此 H 中的 $S_i^+S_j^-$ 和 $S_i^-S_j^+$ 就分别相当于 $a_i b_j$ 和 $a_i^\dagger a_j^\dagger$, 前者减少两个粒子, 后者增加两个粒

---

① 这类似从 Block 波函数到 Wannier 波函数的变换, 可参阅文献[1]p120.

② 究竟哪一套格子选自旋 $+s$, 哪一套选 $-s$, 两种选择似乎无区别. 实际上在反铁磁晶体中有一种很弱的内部场称为各向异性场, 在两套格子处其方向相反, 帮助确定一种选择. 在以下讨论中不影响结论, 此处就略去了.

子. 将它和铁磁情况对比,对铁磁 $S_i^+S_j^-$ 和 $S_i^-S_j^+$ 分别相当于 $a_ia_j^\dagger$ 和 $a_i^\dagger a_j$,它们不改变粒子数.

进行 Holstein-Primakoff 变换,对子格 a 有,

$$\begin{aligned} S_i^+ &= (2s)^{\frac{1}{2}}(1-\cdots)a_i, \\ S_i^- &= (2s)^{\frac{1}{2}}a_i^\dagger(1-\cdots), \\ S_i^z &= s - a_i^\dagger a_i; \end{aligned} \tag{7.1.27}$$

对子格 b 有

$$\begin{aligned} S_j^+ &= (2s)^{\frac{1}{2}}b_j^\dagger(1-\cdots), \\ S_j^- &= (2s)^{\frac{1}{2}}(1-\cdots)b_j, \\ S_j^z &= -s + b_j^\dagger b_j. \end{aligned} \tag{7.1.28}$$

在展开中只取了带头项,这是由以下推演的需要而决定的.

为了从格点算符变到模式算符,进行变换

$$\left.\begin{aligned} c_k &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_i \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i}a_i, \\ d_k &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_j}b_j. \end{aligned}\right\} \tag{7.1.29}$$

在此变换下,两个子格的自旋算符是

$$S_i^+ = \left(\frac{2s}{N}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sum_k \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i}c_k + \cdots\right), \tag{7.1.30}$$

$$S_i^- = \left(\frac{2s}{N}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sum_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i}c_k^\dagger + \cdots\right),$$

$$S_i^z = s - \frac{1}{N}\sum_{k,k'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{R}_i}c_k^\dagger c_k;$$

$$S_j^+ = \left(\frac{2s}{N}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sum_k \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i}d_k^\dagger + \cdots\right), \tag{7.1.31}$$

$$S_j^- = \left(\frac{2s}{N}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sum_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i}d_k + \cdots\right),$$

$$S_j^z = -s + \frac{1}{N}\sum_{k,k'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{R}_i}d_k^\dagger d_k.$$

准到算符的双线性项,H 可改写为

$$H = -2NJ\nu s + 2J\nu s\sum_k[\gamma_k(c_k^\dagger d_k^\dagger + c_kd_k) + (c_k^\dagger c_k + d_k^\dagger d_k)]. \tag{7.1.32}$$

和铁磁情况相比,此处 H 在粒子数占有空间不是对角的,因为它含有使粒子数变化的 $c^\dagger d^\dagger(\Delta N=2)$ 和 $cd(\Delta N=-2)$. 为了使 H 对角化,采用 Bogoliubov 变换①,定义准粒子算符 α_k,β_k 及它们的共轭:

$$\left.\begin{aligned} \alpha_k &= u_kc_k - v_kd_k^\dagger, \quad & \alpha_k^\dagger &= u_kc_k^\dagger - v_kd_k, \\ \beta_k^\dagger &= u_kd_k - v_kc_k^\dagger, \quad & \beta_k &= u_kd_k^\dagger - v_kc_k. \end{aligned}\right\} \tag{7.1.33}$$

---

① 将在第 10 章 10.4 节中系统介绍. 在超导中这个变换也用以使 H 对角化. 那里算符是 Fermi 型的,故有 $u_k^2+v_k^2=1$.

u_k和v_k是实数，并满足

$$u_k^2 - v_k^2 = 1, \tag{7.1.34}$$

这个条件使得α,β算符满足以下对易关系：

$$\left.\begin{aligned}&[\alpha_k, \alpha_{k'}^\dagger] = [\beta_k, \beta_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'},\\&[\alpha_k, \alpha_{k'}] = [\beta_k, \beta_{k'}] = 0,\\&[\alpha_k, \beta_{k'}] = [\alpha_k, \beta_{k'}^\dagger] = \cdots = 0.\end{aligned}\right\} \tag{7.1.35}$$

对角化的目标是

$$H = \sum_k \lambda_k (\alpha_k^\dagger \alpha_k + \beta_k^\dagger \beta_k) + \text{const}, \tag{7.1.36}$$

λ_k是准粒子能量本征值. 这个条件将确定u_k及v_k. 从式(7.1.36)可得

$$[\alpha_k^\dagger, H] = -\lambda_k \alpha_k^\dagger, \quad [\alpha_k, H] = \lambda_k \alpha_k^\dagger. \tag{7.1.37}$$

从式(7.1.32)可以计算$[\alpha_k^\dagger, H]$. 记

$$\omega_0 = 2J\nu s, \quad \omega_1 = 2J\nu s\gamma_k, \tag{7.1.38}$$

则有

$$[\alpha_k^\dagger, H] = -u_k(\omega_0 c_k^\dagger + \omega_1 d_k) - v_k(\omega_0 d_k + \omega_1 c_k^\dagger). \tag{7.1.39}$$

将式(7.1.37)第一式右方的$\alpha_k^\dagger$用式(7.1.33)代替，有

$$[\alpha_k^\dagger, H] = -\lambda_k(u_k c_k^\dagger - v_k d_k). \tag{7.1.40}$$

式(7.1.39)与式(7.1.40)比较，有

$$\omega_0 u_k + \omega_1 v_k = \lambda_k u_k, \quad \omega_1 u_k + \omega_0 v_k = -\lambda_k u_k. \tag{7.1.41}$$

方程组有解条件是

$$\begin{vmatrix}\omega_0 - \lambda_k & \omega_1\\ \omega_1 & \omega_0 + \lambda_k\end{vmatrix} = 0, \tag{7.1.42}$$

即$\lambda_k^2 = \omega_0^2 - \omega_1^2$. 取$\lambda_k$正根（准粒子激发能为正值）：

$$\lambda_k = 2J\nu s(1 - \gamma_k^2)^{1/2}. \tag{7.1.43}$$

计算$[\beta_k^\dagger, H]$，并用对角化要求得到同样的久期方程. 将λ_k代入式(7.1.41)解出u_k,v_k，结果是

$$u_k^2 = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{(1-\gamma_k^2)^{1/2}} + 1\right], \quad v_k^2 = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{(1-\gamma_k^2)^{1/2}} - 1\right]. \tag{7.1.44}$$

将H(式(7.1.33))用α,β表示，则有

$$H = -2NJ\nu s(s+1) + \sum_k 2J\nu s(1-\gamma_k^2)^{1/2}(\alpha_k^\dagger \alpha_k + \beta_k^\dagger \beta_k + 1). \tag{7.1.45}$$

将λ_k记为$\hbar\omega_k$：

$$\hbar\omega_k = 2J\nu s(1-\gamma_k^2)^{1/2} \quad (\text{反铁磁}), \tag{7.1.46}$$

和铁磁k模激发能式(7.1.23)

$$\hbar\omega_k = 2J\nu s(1-\gamma_k) \quad (\text{铁磁})$$

相比，它们有显著差别. 对简单立方晶格（格距为a），当ka小时有

$$\begin{aligned}&\nu(1-\gamma_k) \approx 2(ka)^2,\\&\nu(1-\gamma_k^2)^{1/2} \approx \frac{1}{\sqrt{3}}ka.\end{aligned} \tag{7.1.47}$$

可见铁磁自旋波的低激发色散关系是二次的：

$$\hbar\omega_k = 4Js(ka)^2 \quad (铁磁). \tag{7.1.48}$$

能量与动量平方成正比,因此准粒子是有质量的.而反铁磁自旋波的低激发色散关系是线性的:

$$\hbar\omega_k = \frac{2}{\sqrt{3}}Jska \quad (反铁磁). \tag{7.1.49}$$

能量与动量一次幂成正比,因此准粒子是无质量的.

经过 Bogoliubov 变换后的准粒子真空可以作为 Heisenberg 反铁磁 Hamilton 量的近似基态$|\rangle$:

$$\alpha_k |\rangle = 0, \quad \beta_k |\rangle = 0.$$

自旋波理论对高维($d=2,3$)自旋体系给出了图像清晰的物理描述,且为实验结果所证实.

一维反铁磁链有许多新颖有趣的性质.我们计算量子涨落对一个子格自旋 z 分量平均值的影响.例如子格 A 的自旋 z 分量是

$$\langle S_A^z \rangle = s - \langle a^\dagger a \rangle. \tag{7.1.50}$$

格点算符是模算符式(7.1.29)的逆:

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_k \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i} c_k, \tag{7.1.51}$$

因此

$$a_i^\dagger a_i = \frac{1}{N}\sum_{k,k'} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{R}_i} c_k^\dagger c_{k'}. \tag{7.1.52}$$

Bogoliubov 变换的逆是

$$\begin{aligned} c_k &= u_k\alpha_k - v_k\beta_k^\dagger, \\ d_k^\dagger &= u_k\beta_k^\dagger - v_k\alpha_k. \end{aligned} \tag{7.1.53}$$

代入式(7.1.52)求基态的期望值:

$$\langle a_i^\dagger a_i \rangle = \frac{1}{N}\sum_{k,k'} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{R}_i} \langle | \, u_k\alpha_k^\dagger - v_k\beta_k)(u_{k'}\alpha_{k'} - v_{k'}\beta_{k'}^\dagger) \, |\rangle.$$

对反铁磁基态,有$\langle|\alpha_k^\dagger=0$ 与 $\alpha_k{}'|\rangle=0$.上式平均值中只余下

$$\langle \beta_k\beta_{k'}^\dagger \rangle = \delta_{kk'},$$

因此

$$\langle a_i^\dagger a_i \rangle = \frac{1}{N}\sum_k v_k^2,$$

即

$$\langle S_A^z \rangle = s - \frac{1}{N}\sum_k \frac{1}{2}\left(\frac{1}{(1-\gamma_k^2)^{1/2}} - 1\right). \tag{7.1.54}$$

对二、三维格子,第二项是有限的.对一维链,当 k 小时第二项是 $-\int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\frac{1}{2k}$,积分出现红外发散.这个结果与 s 值无关.一维链的基态对量子涨落是不稳定的.

7.2 O(3)非线性σ模型,对称自发破缺与 Goldstone 定理

非线性 σ 模型原是粒子物理中一个低能有效理论.1+1 维空间中标量场 $\boldsymbol{n}$ 是 N 维内部空间的单位矢量,

$$n^2(x_\mu) = 1, \quad \mu = 0,1. \tag{7.2.1}$$

满足 $O(N)$ 对称①的含有两个微商因子的普遍 Lagrangian 密度是

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2g^2} \mid \partial_\mu \boldsymbol{n} \mid^2, \tag{7.2.2}$$

下面具体讨论 $N=3$ 的情况.将 $\boldsymbol{n}$ 用分量表示,有

$$\boldsymbol{n}(\pi_1, \pi_2, \sigma). \tag{7.2.3}$$

将 π_1, π_2 作为二维矢量的分量,即有 $\boldsymbol{\pi}(\pi_1, \pi_2)$,式(7.2.1)给出

$$\boldsymbol{\pi}^2 + \sigma^2 = 1,$$

即

$$\sigma = (1 - \boldsymbol{\pi}^2)^{1/2}. \tag{7.2.4}$$

式(7.2.2)规定了 $\boldsymbol{n}$ 是单位半径球面上的一点,因此不论怎样选真空态,例如选

$$\boldsymbol{n}_0 = (0,0,1) \tag{7.2.5}$$

它只在沿第3轴转动不变,而不尊重绕第1轴和第2轴转动对称性.这种场的动力学有较高的对称 $O(3)$ 而真空态只有较低对称 $O(1)$ 的情况称为对称自发破缺.从式(7.2.4)有

$$\partial_\mu \sigma = \frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \partial_\mu \boldsymbol{\pi}}{(1 - \boldsymbol{\pi}^2)^{1/2}},$$

$\mathscr{L}$ 即可写成

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2g^2}\left(\mid \partial_\mu \boldsymbol{\pi} \mid^2 + \frac{(\boldsymbol{\pi} \cdot \partial_\mu \boldsymbol{\pi})^2}{1 - \boldsymbol{\pi}^2} \right). \tag{7.2.6}$$

这是把 σ 场消去后的 $\boldsymbol{\pi}$ 场有效 Lagrange 量,出现 $\boldsymbol{\pi}$ 场自耦合,但没有 $\boldsymbol{\pi}$ 场的质量项. π_1, π_2 两个场是没有质量的,这是 Goldstone 定理的一个特例.根据这个定理,连续对称自发破缺会出现无质量粒子(激发).考虑一个 $O(3)$ 对称理论.如果真空态是(0,0,0),则它尊重 $O(3)$ 的三个对称操作.但若加上一个条件 $\boldsymbol{n}^2=1$,则排除了这种真空态. $\boldsymbol{n}(0,0,1)$ 自发破缺了两个对称操作余下一个,故出现两个无质量粒子 π_1, π_2. Goldstone 定理[4,5]称"对每一个自发破缺的连续变换,理论应含一个无质量粒子".下面以自旋为0的粒子为例给出证明. Lagrange 密度是

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}\partial_\mu \varphi^a \partial^\mu \varphi^a - V(\varphi), \tag{7.2.7}$$

φ 是标量场(自旋为0), $a=1,\cdots,N$ 是内部对称自由度.令 φ_0^a 为常数场,它使 $V(\varphi)$ 取最小值:

$$\frac{\partial V}{\partial \varphi^a}\bigg|_{\varphi^a(x)=\varphi_0^a} = 0. \tag{7.2.8}$$

由于 φ_0^a 是常数,它的"动能"项($\mathscr{L}$ 的第一项)为0,即 φ_0^a 就是体系的基态(真空).将 V 在此最小值处展开,有

$$V(\varphi) = V(\varphi_0) + \frac{1}{2}(\varphi - \varphi_0)^a (\varphi - \varphi_0)^b \frac{\partial^2}{\partial \varphi^a \partial \varphi^b} V\bigg|_{\varphi=\varphi_0} + \cdots. \tag{7.2.9}$$

式中没有线性项,因为在 φ_0 处 V 是极小值.和谐振子势 $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ 相类比,势能项与 x^2 成正

---

① 即在 N 维空间中沿任何一轴转动都保持不变.

比的部分其系数与质量 m 成正比. 因此第二项系数

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^a\partial\varphi^b}V\right)\Big|_{\varphi=\varphi_0} \equiv m_{ab}^2 \tag{7.2.10}$$

是 $N\times N$ 对称矩阵，它的本征值给出场的质量. 因 φ_0 是 V 的极小值，故本征值永不为负. 需要证明的是，每一个连续对称，只要它是基态 φ_0 所不满足的，都给出一个 m_{ab}^2 矩阵的零本征值.

一般的连续变换可用下式定义：

$$\varphi^a \to \varphi^a + \alpha\Delta^a(\varphi), \tag{7.2.11}$$

α 是无穷小参数，$\Delta^a(\varphi)$是 φ 所有分量的函数. 对常数场，$\mathscr{L}$ 的微商项为 0. 不变性要求 V 在此变换下不变：

$$V(\varphi^a) = V(\varphi^a + \alpha\Delta^a),$$

即

$$\frac{\partial V(\varphi)}{\partial\varphi^a}\Delta^a(\varphi) = 0. \tag{7.2.12}$$

对 φ^b 求微商，并在 $\varphi=\varphi_0$ 处取值，有

$$\left(\frac{\partial V}{\partial\varphi^a}\right)_{\varphi_0}\left(\frac{\partial\Delta^a}{\partial\varphi^b}\right)_{\varphi_0} + \Delta^a(\varphi_0)\left(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^a\partial\varphi^b}V\right)_{\varphi_0} = 0.$$

上式左边第一项为 0. 因在 φ_0 处 V 取极小值，因此第二项必须为 0. 若 φ_0 对连续变换(式(7.2.11))不变，即 $\Delta^a(\varphi_0)=0$，则要求自动得到满足. 若 $\Delta^a(\varphi_0)\neq 0$，即连续变换式(7.2.11)被自发破缺，则必定有

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^a\partial\varphi^b}V\right)_{\varphi_0} = 0, \tag{7.2.13}$$

即质量本征值为 0，定理得证.

现在回到反铁磁自旋波理论. 由 $\alpha^\dagger$ 和 $\beta^\dagger$ 产生的无质量粒子相应于 $SO(3)$ 自发破缺到绕 z 轴转动的 $O(1)$ 的两个 Goldstone 模. 有启发性的是计算自旋波理论中的长程关联 $\langle \boldsymbol{S}(x)\cdot\boldsymbol{S}(0)\rangle$，$x\to\infty$. 结果是

$$\langle \boldsymbol{S}(x)\cdot\boldsymbol{S}(0)\rangle \to \pm s^2\left[1-\frac{1}{\pi s}\ln\frac{x}{a}+O\left(\frac{1}{s^2}\right)\right],$$

此处 a 是晶格常数. 这表明反铁磁一维链只有短程序. 在长度达到

$$\xi = a\mathrm{e}^{\pi s}$$

量级时，关联就趋于零. 对称自发破缺(长程序)要求关联在大距离时趋于 $\pm s^2$. 由此可见，一维反铁磁链的无质量准粒子不可能是 Goldstone 玻色子.

7.3 一维量子反铁磁链，拓扑相因子，到 $O(3)$ 非线性 σ 模型的映射

对一维自旋链的研究始于 1931 年的“Bethe 创议”(Bethe's ansatz)[6,7]. 结论是自旋 1/2 一维链没有长程序，但有无质量激发. 此后在 50 年代，70 年代陆续有研究成果出现. 在 1983 年 F. D. M. Haldane[8,9,10] 提出一维反铁磁链的性质取决于自旋是整数或半整数. 整数自旋的激发有能隙，而半整数自旋的激发是无质量的. 这被称为 Haldane 猜想(conjecture). 和第 6 章单畴磁性颗粒宏观量子相干的拓扑淬灭十分类似. Lieb-Schultz-Mattis 定理[11] 指

出：自旋奇偶性区别的来源是 Wess-Zumino 拓扑项.

考虑一维量子反铁磁链，自旋值为 s，格距为 a. 有两套子格（图 7.2），在每套子格中自旋基本上取向一致，两套格子上自旋基本取相反方向. 定义

$$\boldsymbol{\Omega}_{2i+\frac{1}{2}} = \frac{\boldsymbol{S}_{2i+1} - \boldsymbol{S}_{2i}}{2s}, \quad \boldsymbol{l}_{2i+\frac{1}{2}} = \frac{\boldsymbol{S}_{2i+1} + \boldsymbol{S}_{2i}}{2a}. \tag{7.3.1}$$

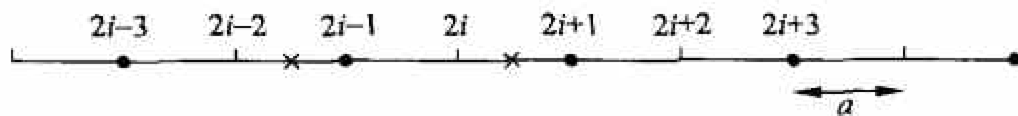


图 7.2　一维反铁磁链

· 为子格 A；| 为子格 B；× 表示 $\boldsymbol{\Omega}$，$\boldsymbol{l}$ 在两套子格格点间定义的点

格点 $2i$ 和 $2i+1$ 分属不同子格，$\boldsymbol{\Omega}$ 和 $\boldsymbol{l}$ 定义在两套子格中间的点 $2i+\frac{1}{2}$. 对 Néel 态 $|\boldsymbol{\Omega}|=1$，$\boldsymbol{l}=0$. $\boldsymbol{\Omega}$ 就是 Néel 矢量. 从式(7.3.1)，有

$$\left.\begin{aligned} a\boldsymbol{l}_{2i+\frac{1}{2}} + s\boldsymbol{\Omega}_{2i+\frac{1}{2}} &= \boldsymbol{S}_{2i+1}, \\ a\boldsymbol{l}_{2i+\frac{1}{2}} - s\boldsymbol{\Omega}_{2i+\frac{1}{2}} &= \boldsymbol{S}_{2i}. \end{aligned}\right\} \tag{7.3.2}$$

格点上的自旋通过式(7.3.2)用格点间（在它左侧）的 $\boldsymbol{\Omega}$ 和 $\boldsymbol{l}$ 表示. 式(7.3.1)给出

$$\left.\begin{aligned} &\boldsymbol{\Omega}\cdot\boldsymbol{l} = 0, \\ &s^2\boldsymbol{\Omega}^2 + a^2\boldsymbol{l}^2 = s(s+1). \end{aligned}\right\} \tag{7.3.3}$$

式中的 $\boldsymbol{\Omega}$ 和 $\boldsymbol{l}$ 指在同一点定义的场. 第二式又可写作

$$\boldsymbol{\Omega}^2 = 1 + \frac{1}{s} - \frac{a^2\boldsymbol{l}^2}{s^2}, \tag{7.3.4}$$

即在 s 极限下，$\boldsymbol{\Omega}^2 \to 1$. 从 $\boldsymbol{S}$ 分量的对易关系可以得到 $\boldsymbol{\Omega}$，$\boldsymbol{l}$ 分量的对易关系. 以 a,b,c 代表分量，它们是

$$\begin{aligned} [\Omega^a_{2i+\frac{1}{2}}, \Omega^b_{2j+\frac{1}{2}}] &= \frac{1}{4s^2}[S^a_{2i+1} - S^a_{2i}, S^b_{2j+1} - S^b_{2j}] \\ &= \frac{\mathrm{i}}{4s^2}\varepsilon^{abc}\delta_{ij}(S^c_{2i+1} + S^c_{2i}) \\ &= \frac{\mathrm{i}a}{2s^2}\varepsilon^{abc}\delta_{ij}l^c_{2i+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \tag{7.3.5}$$

（上式中 ε^{abc} 是反对称单位张量）；

$$\begin{aligned} [l^a_{2i+\frac{1}{2}}, l^b_{2j+\frac{1}{2}}] &= \frac{1}{4a^2}[S^a_{2i} + S^a_{2i+1}, S^b_{2j} + S^b_{2j+1}] \\ &= \frac{\mathrm{i}}{4a^2}\varepsilon^{abc}\delta_{ij}(S^c_{2i} + S^c_{2i+1}) \\ &= \frac{\mathrm{i}}{2a}\varepsilon^{abc}\delta_{ij}l^c_{2i+\frac{1}{2}}; \end{aligned} \tag{7.3.6}$$

$$\begin{aligned} [l^a_{2i+\frac{1}{2}}, \Omega^b_{2j+\frac{1}{2}}] &= \frac{1}{4as}[S^a_{2i} + S^a_{2i+1}, S^b_{2j} - S^b_{2j+1}] \\ &= \frac{\mathrm{i}}{4as}\varepsilon^{abc}\delta_{ij}(S^c_{2i+1} - S^c_{2i}) \\ &= \frac{\mathrm{i}}{2a}\varepsilon^{abc}\delta_{ij}\Omega^c_{2j+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \tag{7.3.7}$$

取连续极限 $a\to0$,

$$\frac{\delta_{ij}}{2a}\to\delta(x-y) \tag{7.3.8}$$

对易关系变为

$$\left.\begin{aligned}&[l^a(x),l^b(y)]=\mathrm{i}\varepsilon^{abc}l^c(x)\delta(x-y),\\&[l^a(x),\Omega^b(y)]=\mathrm{i}\varepsilon^{abc}\Omega^c(x)\delta(x-y),\\&[\Omega^a(x),\Omega^b(y)]=0.\end{aligned}\right\} \tag{7.3.9}$$

式(7.3.9)中第一式是角动量分量(转动的生成元)的对易关系,第二式表明$\boldsymbol{\Omega}$是三维矢量.

下面将 Heisenberg 模型的 Hamilton 量用$\boldsymbol{\Omega}$,$\boldsymbol{l}$ 表示,并取连续极限以得到场论的 Hamilton 量.模型 Hamilton 量中是近邻间的自旋相互作用.对两套子格中的一套子格求和即可,只要它包括进来一个格点的自旋和它的左右近邻相互作用.用$\boldsymbol{\Omega}$,$\boldsymbol{l}$代替$\boldsymbol{S}$,得

$$\begin{aligned}H&=J\sum_{2i}(\boldsymbol{S}_{2i}\cdot\boldsymbol{S}_{2i+1}+\boldsymbol{S}_{2i}\cdot\boldsymbol{S}_{2i-1})\\&=J\sum_{2i}(a^2\boldsymbol{l}^2_{2i+\frac12}-s^2\boldsymbol{\Omega}^2_{2i+\frac12}+a^2\boldsymbol{l}_{2i+\frac12}\cdot\boldsymbol{l}_{2i-\frac32}\\&\quad-s^2\boldsymbol{\Omega}_{2i+\frac12}\cdot\boldsymbol{\Omega}_{2i-\frac32}+as\boldsymbol{l}_{2i+\frac12}\cdot\boldsymbol{\Omega}_{2i-\frac32}+as\boldsymbol{\Omega}_{2i+\frac12}\cdot\boldsymbol{l}_{2i-\frac32}).\end{aligned} \tag{7.3.10}$$

式中 $\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{\Omega}$ 的二项可改写为

$$-2a^2s\left\{\boldsymbol{l}_{2i+\frac12}\cdot\left(\frac{\boldsymbol{\Omega}_{2i+\frac32}-\boldsymbol{\Omega}_{2i-\frac32}}{2a}\right)-\boldsymbol{\Omega}_{2i+\frac12}\cdot\left(\frac{\boldsymbol{l}_{2i+\frac32}-\boldsymbol{l}_{2i-\frac32}}{2a}\right)\right\}.$$

另外再加上为零的二项(见式(7.3.3)第二式)

$$\frac32(s^2\boldsymbol{\Omega}^2_{2i+\frac12}+a^2\boldsymbol{l}^2_{2i+\frac12}-s(s+1))+\frac12(s^2\boldsymbol{\Omega}^2_{2i-\frac32}+a^2\boldsymbol{l}^2_{2i-\frac32}-s(s+1)),$$

H 可写成

$$\begin{aligned}H=J\sum_{2i}\Big\{&\left(\frac52a^2\boldsymbol{l}^2_{2i+\frac12}+\frac12a^2\boldsymbol{l}^2_{2i-\frac32}+a^2\boldsymbol{l}_{2i+\frac12}\cdot\boldsymbol{l}_{2i-\frac32}\right)\\&+\frac{s^2}{2}(\boldsymbol{\Omega}^2_{2i+\frac12}+\boldsymbol{\Omega}^2_{2i-\frac32}-2\boldsymbol{\Omega}_{2i+\frac12}\cdot\boldsymbol{\Omega}_{2i-\frac32})\\&-2a^2s\boldsymbol{l}_{2i+\frac12}\cdot\left(\frac{\boldsymbol{\Omega}_{2i+\frac12}-\boldsymbol{\Omega}_{2i-\frac32}}{2a}\right)+2a^2s\boldsymbol{\Omega}_{2i+\frac12}\left(\frac{\boldsymbol{l}_{2i+\frac12}-\boldsymbol{l}_{2i-\frac32}}{2a}\right)\Big\}\\&-J2s(s+1).\end{aligned}$$

最后一项是常数,可略去.第一个圆括弧中三项都有小量 a^2.在 $2i+\frac12$和 $2i-\frac32$两点上的 $\boldsymbol{l}$ 场的差与 a 成正比.因此略去 a^3 时可以把它们视为相等,即第一个圆括弧就等于 $4a^2\boldsymbol{l}^2_{2i+\frac12}$.第二个圆括弧是 $4a^2\left(\frac{\boldsymbol{\Omega}_{2i+\frac12}-\boldsymbol{\Omega}_{2i-\frac32}}{2a}\right)^2$.将 $2i+\frac12$点的坐标定为 x,这个量就是 $4a^2\boldsymbol{\Omega}'^2(x)$,撇号代表对 x 的微商.花括弧中最后两项之和为

$$-2a^2s(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{\Omega}'-\boldsymbol{\Omega}\cdot\boldsymbol{l}')=-2a^2s(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{\Omega}'+\boldsymbol{\Omega}'\cdot\boldsymbol{l}),$$

因为从$\boldsymbol{\Omega}\cdot\boldsymbol{l}=0$(见式(7.3.3))有$\boldsymbol{\Omega}\cdot\boldsymbol{l}'+\boldsymbol{\Omega}'\cdot\boldsymbol{l}=0$.取连续极限 $2a\to\mathrm{d}x$,H 变为

$$H=\int\mathrm{d}x(Ja)\{2\boldsymbol{l}^2+s^2\boldsymbol{\Omega}'^2-s(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{\Omega}'+\boldsymbol{\Omega}'\cdot\boldsymbol{l})\}.$$

Hamilton 量密度 $\mathscr{H}$ 可以写作

$$\mathscr{H}=\frac{v}{2}\left\{g^2\left(\boldsymbol{l}-\frac{\Theta}{4\pi}\boldsymbol{\Omega}'\right)^2+\frac{1}{g^2}\boldsymbol{\Omega}'^2\right\}, \tag{7.3.11}$$

此处

$$v=2Jas,\quad g^2=\frac{2}{s},\quad \Theta=2\pi s, \tag{7.3.12}$$

在大的 s 极限下，$\boldsymbol{\Omega}^2=1$. 因此可以用单位球上的点(球坐标 θ,ϕ)描述$\boldsymbol{\Omega}$ 的运动. 相应的广义动量算符是

$$\begin{aligned}\pi_\theta&=-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial\theta},\\ \pi_\phi&=-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}.\end{aligned} \tag{7.3.13}$$

下一个步骤是将 $\mathscr{H}$ 用广义坐标及广义动量表示. $\boldsymbol{l}$ 是转动的生成元(角动量)，故其分量是

$$\left.\begin{aligned}l_x&=-\sin\phi\left(-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial\theta}\right)-\cos\phi\cot\theta\left(-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right)=-\sin\phi\pi_\theta-\cos\phi\cot\theta\pi_\phi,\\ l_y&=\cos\phi\left(-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial\theta}\right)-\sin\phi\cot\theta\left(-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right)=\cos\phi\pi_\theta-\sin\phi\cot\theta\pi_\phi,\\ l_z&=-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}=\pi_\phi.\end{aligned}\right\} \tag{7.3.14}$$

$\boldsymbol{\Omega}$ 及其微商的分量是

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Omega}&=(\sin\theta\cos\phi,\sin\theta\sin\phi,\cos\theta),\\ \frac{\partial\boldsymbol{\Omega}}{\partial\theta}&=(\cos\theta\cos\phi,\cos\theta\sin\phi,-\sin\theta),\\ \frac{\partial\boldsymbol{\Omega}}{\partial\phi}&=(-\sin\theta\sin\phi,\sin\theta\cos\phi,0).\end{aligned}$$

因此$\boldsymbol{\Omega}'$的分量是

$$\boldsymbol{\Omega}'=(\cos\theta\cos\phi\theta'-\sin\theta\sin\phi\phi',\cos\theta\sin\phi\theta'+\sin\theta\cos\phi\phi',-\sin\theta\theta'). \tag{7.3.15}$$

将式(7.3.14)和式(7.3.15)代入式(7.3.11)就得到

$$\begin{aligned}\mathscr{H}=&\frac{v}{2}g^2\left\{\left(\pi_\theta-\frac{\Theta}{4\pi}\phi'\sin\theta\right)^2+\frac{1}{\sin^2\theta}\left(\pi_\phi+\frac{\Theta}{4\pi}\theta'\sin\theta\right)^2\right\}\\ &+\frac{v}{2g^2}(\theta'^2+\phi'^2\sin^2\theta).\end{aligned} \tag{7.3.16}$$

相应的 Lagrange 量密度是

$$\mathscr{L}=\frac{v}{2g^2}[(\partial_\mu\theta)^2+\sin^2\theta(\partial_\mu\phi)^2]+\frac{\Theta}{8\pi}\sin\theta\epsilon^{\mu\nu}\partial_\mu\theta\partial_\nu\phi. \tag{7.3.17}$$

此处 $\epsilon^{\mu\nu}$ 是反对称单位张量，$\mu,\nu=0,1$. $\mathscr{H}$和 $\mathscr{L}$ 的关系可以直接验证. 在以下讨论中置 $v=1$. 从式(7.3.17)出发，求共轭动量

$$\left.\begin{aligned}\pi_\theta&=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot\theta}=\frac{1}{g^2}\dot\theta+\frac{\Theta}{4\pi}\sin\theta\phi',\\ \pi_\phi&=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot\phi}=\frac{1}{g^2}\dot\phi\sin^2\theta-\frac{\Theta}{4\pi}\sin\theta\theta'.\end{aligned}\right\} \tag{7.3.18}$$

在进行量子化后 θ 和 π_θ 以及 ϕ 及 π_ϕ 满足正则对易关系. 将式(7.3.17)、式(7.3.18)代入式

$$\mathscr{H} = \pi_\theta \dot{\theta} + \pi_\phi \dot{\phi} - \mathscr{L},$$

便可以得到式(7.3.16). 式(7.3.17)可以用$\boldsymbol{\Omega}$表示. 由于

$$\mathrm{d}\boldsymbol{\Omega} = \hat{\boldsymbol{\phi}}\mathrm{d}\theta + \hat{\boldsymbol{\theta}}\sin\theta\mathrm{d}\phi.$$

此处$\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 和$\hat{\boldsymbol{\phi}}$ 是 θ 和 ϕ 增加方向的单位矢量. 另有

$$\partial_\mu \boldsymbol{\Omega} \cdot \partial^\mu \boldsymbol{\Omega} = (\partial_\mu \theta)^2 + \sin^2\theta(\partial_\mu \phi)^2,$$

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot (\partial_\mu \boldsymbol{\Omega} \times \partial_\nu \boldsymbol{\Omega}) = \sin\theta \partial_\mu \theta \partial_\nu \phi.$$

由此，$\mathscr{L}$ 可以写作

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2g^2}\partial_\mu \boldsymbol{\Omega} \cdot \partial^\mu \boldsymbol{\Omega} + \frac{\Theta}{8\pi}\varepsilon^{\mu\nu} \boldsymbol{\Omega} \cdot (\partial_\mu \boldsymbol{\Omega} \times \partial_\nu \boldsymbol{\Omega}). \tag{7.3.19}$$

这是非线性 σ 模型的标准形式，式中右边第二项称为 Wess-Zumino 项. 从式(7.3.17)中这一项的形式看，它实际上是二维散度，因为可以定义流 K^μ：

$$K^\mu = -\varepsilon^{\mu\nu}\cos\theta\partial_\nu \phi,$$

立即可以验证

$$\partial_\mu K^\mu = \varepsilon^{\mu\nu}\sin\theta\partial_\mu\theta\partial_\nu\phi.$$

一个散度项加到 Lagrange 密度中是不会影响运动方程的. 原因是它的空间积分可以通过 Gauss 定理换成表面积分，最后归结为常数. 在对作用量求变分得运动方程时，常数是不起作用的. 在作场论微扰时它也不起作用，但它有重要的非微扰影响. 一维反铁磁链的 Hilbert 空间分为不同 Θ 值的部分，不同 Θ 值部分之间通过正则变换联系. 指出这一点的是 Affleck[3]. 考虑变换

$$U = \exp\left(\mathrm{i}\,\frac{\Theta}{4\pi}\int \mathrm{d}x\phi'\cos\theta\right) \equiv \mathrm{e}^A. \tag{7.3.20}$$

式(7.3.19)显示 Wess-Zumino 项的作用是重新定义广义动量. 在变换 U 下广义动量的变化是

$$\pi \to U\pi U^{-1}.$$

用 Baker-Campbell-Hausdorff 公式

$$\mathrm{e}^A B \mathrm{e}^{-A} = B + [A,B] + \frac{1}{2!}[A,[A,B]] + \cdots, \tag{7.3.21}$$

首先计算$[A,\pi_\theta]$：

$$[A,\pi_\theta(x)] = \mathrm{i}\,\frac{\Theta}{4\pi}\int \mathrm{d}x'\,\frac{\mathrm{d}\phi(x')}{\mathrm{d}x'}[\cos\theta(x'),\pi_\theta(x)],$$

其中

$$[\cos\theta(x'),\pi_\theta(x)] = -\sin\theta(x')[\theta(x'),\pi_\theta(x)] = -\sin\theta(x')\mathrm{i}\delta(x-x').$$

因此得到

$$[A,\pi_\theta(x)] = -\frac{\Theta}{4\pi}\int \mathrm{d}x'\,\frac{\mathrm{d}\phi(x')}{\mathrm{d}x'}\sin\theta(x')\delta(x'-x) = -\frac{\Theta}{4\pi}\phi'\sin\theta.$$

此外有

$$[A,[A,\pi_\theta(x)]] = 0,$$

故总起来有

$$\pi_\theta \to \pi_\theta - \frac{\Theta}{4\pi}\phi' \sin\theta. \tag{7.3.22}$$

类似地有①

$$\pi_\phi \to \pi_\phi + \frac{\Theta}{4\pi}\theta' \sin\theta. \tag{7.3.23}$$

结论是：从没有 Θ 项的广义动量出发，经过正则变换（式(7.3.20)）就重新定义了它，引入了含 Θ 的项.

在路径积分讨论中，常用欧氏空间，在其中 Θ 项的贡献是

$$\mathrm{i}\Theta \cdot \frac{1}{8\pi}\int \epsilon^{ij}\,\boldsymbol{\Omega}\cdot(\partial_i\boldsymbol{\Omega}\times\partial_j\boldsymbol{\Omega})\,\mathrm{d}^2x \equiv \mathrm{i}\Theta Q, \tag{7.3.24}$$

Q 称为拓扑荷，是整数②. 路径积分中的 e^{-S_E} 因子包含 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Theta Q}$，$\Theta$ 就作为相角出现了，称为拓扑相. 从式(7.3.12)看，Θ 是和格点上自旋 s 有关的，$\Theta=2\pi s$. 作为相角，整数自旋相当于 $\Theta=0$，半整数自旋相当于 $\Theta=\pi$. 它们的物理性质将很不同. 拓扑项由于含有空间微商 $\partial_1\boldsymbol{\Omega}$，它破坏宇称守恒. 但对反铁磁链 $\Theta=0$ 这项消失，对 $\Theta=\pi$ 又有 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi Q}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi Q}$，因此不出现宇称破坏情况.

现在集中考虑整数自旋 $\Theta=0$ 的 Néel 矢量 $\boldsymbol{\Omega}$ 的 Lagrange 量密度

$$\mathcal{L}=\frac{1}{2g^2}\partial_\mu\boldsymbol{\Omega}\cdot\partial^\mu\boldsymbol{\Omega}.$$

假定对称自发破缺，真空态为(0,0,1). 在真空态附近的场的位形是 $(\boldsymbol{\Omega}^1,\boldsymbol{\Omega}^2,1-\boldsymbol{\Omega}^1\boldsymbol{\Omega}^1-\boldsymbol{\Omega}^2\boldsymbol{\Omega}^2)\approx(\boldsymbol{\Omega}^1,\boldsymbol{\Omega}^2,1)$. 因此 $\mathcal{L}\approx\frac{1}{2g^2}\sum_{i=1}^{2}(\partial_\mu\boldsymbol{\Omega}^i)^2$，体系由两个 Goldstone 玻色子近似. 子格磁化 $s\langle\boldsymbol{\Omega}^3\rangle$ 和自旋波的情况一样，是红外发散的[3]，意味着对称不会自发破缺.

重正化群方法的研究③给出耦合常数 g 对尺度 L 的依赖是

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\ln L}g^2=\frac{g^4}{2\pi},$$

结果是有效耦合随尺度的增加而增大：

$$g^2(L)\approx\frac{g_0^2}{1-\frac{g_0^2}{2\pi}\ln L}.$$

最初在格点上的耦合常数是 $g_0^2=\frac{2}{s}$（见式(7.3.12)）. 在 L 达到

$$\xi\approx \mathrm{e}^{2\pi/g_0^2}=\mathrm{e}^{\pi s}$$

时，g^2 达到 $O(1)$. 通常有这类重正化群行为的场论会由于红外涨落产生能隙，质量为 $O(\xi^{-1})$. 这个结论对整数、半整数自旋都适用. 一维反铁磁链的特殊性在于，对半整数自旋有 $\Theta=\pi$ 的拓扑项，它的非微扰效应改变了 Coleman 定理以及重正化群分析的推论. Wess-Zumino 项对于微扰论没有贡献，而重正化群理论涉及微扰计算.

---

① 中间结果：$[A,\pi_\phi(x)]=\frac{\Theta}{4\pi}\sin\theta\theta'$.

② 见式(7.5.2)的讨论.

③ 此处重正化群相当于逐步对高频率模式求积分以得到低频的有效理论. 在逐步积分过程中耦合"常数"随之改变有效值，结果会和尺度有关[12].

7.4 Lieb-Schultz-Mattis 定理

一维反铁磁链理论在大 s 极限下根据自旋的奇偶性分别映射到 $\Theta=0$ 或 π 的场论. 关于半整数自旋链性质的线索来自一个定理，它首先由 Lieb，Schultz 和 Mattis 对 $s=1/2$ 情况证明，此后由 Affleck 和 Lieb[14]推广到任意半整数自旋. 这个定理称：遵守平移对称性和自旋空间转动对称性的半整数自旋链或者有无能隙的激发态，或者有相反宇称的简并基态.

考虑偶数格距组成的长度为 L 的有限链，满足周期条件①. 设基态 $|\psi_0\rangle$（能量为 E_0）满足宇称和转动不变性. 构造一个状态 $|\psi_1\rangle$ 使下式成立：

$$\langle\psi_1 \mid H-E_0 \mid \psi_1\rangle = O\left(\frac{1}{L}\right), \tag{7.4.1}$$

$|\psi_1\rangle$ 的具体构造方法是

$$|\psi_1\rangle = U \mid \psi_0\rangle, \tag{7.4.2}$$

$$U = \exp\left\{\frac{\mathrm{i}\pi}{l}\sum_{j=-l}^{l}(j+l)S_j^z\right\}. \tag{7.4.3}$$

它代表对 $j=-l$ 到 $j=l$ 的各格点的自旋沿 z 轴转动：在 $j=-l$ 处转 0，在 $j=-l+1$ 处转 $\frac{\pi}{l}$，…，在 $j=0$ 处转 π，…，在 $j=l$ 处转 2π. 在 $j=\pm l$ 外面的自旋不作变换. l 的值选为 $O(L)$. 例如选 $2l=\frac{L}{2}-1$，使约半数格点上的自旋转一定角度. 下面要证明两件事：①$|\psi_1\rangle$ 的能量是很低的，即式(7.4.1)中，当 L 很大时，它的能量连续逼近基态. ②$|\psi_1\rangle$ 与 $|\psi_0\rangle$ 正交. 正交之所以必需，是因为如果在 $L\to\infty$ 过程中 $|\psi_1\rangle\to|\psi_0\rangle$，就什么也没有证明. 既然它们正交，就排除了这种可能性，因此 $s=1/2$ 反铁磁自旋链具有无质量的激发态.

相邻两个格点上自旋相对旋转是小的，$\frac{\pi}{l}\ll 1$. 由于体系能量是由最近邻自旋取向决定，这种构造使得所费能量很小. 确切的是，

$$\left.\begin{aligned} U^{\dagger}S_i^{+}S_{i+1}^{-}U &= \exp\left(-\mathrm{i}\,\frac{\pi}{l}\right)S_i^{+}S_{i+1}^{-},\\ U^{\dagger}S_i^{-}S_{i+1}^{+}U &= \exp\left(\mathrm{i}\,\frac{\pi}{l}\right)S_i^{-}S_{i+1}^{+},\\ U^{\dagger}S_i^{z}S_{i+1}^{z}U &= S_i^{z}S_{i+1}^{z}. \end{aligned}\right\} \tag{7.4.4}$$

因此

$$\begin{aligned} \delta E &\equiv \langle\psi_1 \mid H-E_0 \mid \psi_1\rangle = \langle\psi_0 \mid U^{\dagger}(H-E_0)U \mid \psi_0\rangle \\ &= \frac{J}{2}\sum_{i=-l}^{l}\langle\psi_0 \mid \left(\exp\left(-\mathrm{i}\,\frac{\pi}{l}\right)-1\right)S_i^{+}S_{i+1}^{-} + \left(\exp\left(\mathrm{i}\,\frac{\pi}{l}\right)-1\right)S_i^{-}S_{i+1}^{+} \mid \psi_0\rangle \\ &= \frac{J}{2}\left(\cos\frac{\pi}{l}-1\right)\sum_{i=-l}^{l}\langle\psi_0 \mid S_i^{+}S_{i+1}^{-}+S_i^{-}S_{i+1}^{+} \mid \psi_0\rangle \\ &\quad -\frac{J}{2}\mathrm{i}\,\sin\frac{\pi}{l}\sum_{i=-l}^{l}\langle\psi_0 \mid S_i^{+}S_{i+1}^{-}-S_i^{-}S_{i+1}^{+} \mid \psi_0\rangle. \end{aligned}$$

① 对反铁磁，只有偶数格距（奇数格点）才能满足边界条件.

由于$|\psi_0\rangle$满足宇称不变性，最后一个等式右方第一项两个算符平均值相等，第二项两个算符平均值相抵消.故有

$$\delta E = J\left(\cos\frac{\pi}{l}-1\right)\sum_i\langle\psi_0 \mid S_i^+S_{i+1}^- \mid \psi_0\rangle.$$

又因$|\psi_0\rangle$满足旋转对称性，$S_i^+S_{i+1}^-$平均值应是$\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_{i+1}$平均值的2/3.从$-l$到$l$共有$2l+2$对最近邻.设一对最近邻的耦合能为$\varepsilon_0$，则有

$$J\sum_{i=-l}^{l}\langle\psi_0 \mid S_i^+S_{i+1}^- \mid \psi_0\rangle = \frac{2}{3}\varepsilon_0(2l+2),$$

故有

$$\delta E = \frac{2}{3}\varepsilon_0\left(\cos\frac{\pi}{l}-1\right)(2l+2) = O\left(\frac{1}{l}\right).$$

由于l选定为$O(L)$，故有$\delta E=O\left(\frac{1}{L}\right)$.这就是式(7.4.1).

下面证明$|\psi_1\rangle$与$|\psi_0\rangle$宇称相反，故它们正交.作宇称变换，并作对自旋空间y轴转π角的操作.它使$S_i^z\to -S_{-i}^z$.在此对称操作下，原变换式(7.4.3)变为

$$U = \exp\frac{\mathrm{i}\pi}{l}\sum_{j=-l}^{l}(j+l)(-S_{-j}^z).$$

将求和哑标j换为$-j$，上式右方变为

$$\exp\left[\frac{\mathrm{i}\pi}{l}\sum_{j=-l}^{l}(j+l)S_j^z\right]\exp\left[-2\mathrm{i}\pi\sum_{j=-l}^{l}S_j^z\right] = \exp\left[-2\mathrm{i}\pi\sum_{j=-l}^{l}S_j^z\right].$$

因为在格点$-l$到l间共有$2l+1$个自旋，就有

$$\exp\left[-2\mathrm{i}\pi\sum_{j=-l}^{l}S_j^z\right] = \begin{matrix} 1, & \text{整数自旋 } s, \\ -1, & \text{半整数自旋 } s. \end{matrix}$$

结论是对半整数自旋$\langle\psi_1|\psi_0\rangle=0$.这个结论有两种推论.或者有一个宇称与基态相反的无能隙激发态，或者宇称自发破缺，有两个宇称相反的简并基态，在基态上面的激发是有能隙的.两种可能性在不同的模型中都有实现[3]. I. Affleck把上述的论证称为“物理学家的证明”，很难把论证做到很严格.我们得到的图画是：一维反铁磁链因为量子涨落的红外发散而不发生对称自发破缺.对于整数自旋，基态是唯一的，激发是有能隙的.对半整数自旋，或者基态是简并的，激发有能隙，或者由于拓扑项的非微扰效应使能隙为零.

实验结果表明，准一维自旋为1的反铁磁链$CsNiCl_3$观察到了质量隙，自旋为1/2的反铁磁链$CuCl_2\cdot 2(NC_5H_5)$没有质量隙.

Coleman定理判定一维反铁磁链的红外发散导致其激发的质量隙. Affleck和Lieb对Lieb-Schultz-Mattis定理的推广表明，半整数自旋一维反铁磁链确实逃避了Coleman定理的判断，出现无质量激发.而整数自旋Lieb-Schultz-Mattis定理论据不成立，因此应满足Coleman定理的判断.二者的差别是拓扑的原因.

本节内容推导源于文献[3].

7.5 拓扑项的意义

在欧氏空间令$x_2=\mathrm{i}x_0$(x_0是时间坐标)，Lagrange量密度是

$$\mathscr{L}_{\mathrm{E}} = \frac{1}{2g^2}((\partial_1\boldsymbol{\Omega})^2+(\partial_2\boldsymbol{\Omega})^2)+\mathrm{i}\frac{\Theta}{8\pi}\varepsilon_{ij}(\partial_i\boldsymbol{\Omega}\times\partial_j\boldsymbol{\Omega}). \tag{7.5.1}$$

$\boldsymbol{\Omega}(x)$是从二维欧氏空间一点到内部空间单位二维球面 S_2 上一点的映射. 要求作用量有即,即

$$\int d^2 x \mathscr{L}_E[\boldsymbol{\Omega}(x)] = \text{有限}.$$

这个条件要求在欧氏平面无穷远处有

$$\lim_{|x|\to\infty} \boldsymbol{\Omega}(x) = \boldsymbol{\Omega}_0,$$

其中$\boldsymbol{\Omega}_0$ 为常数. 这个要求所以必要,是因为不为 0 的微商项在无限大的空间中积分不能保证有限作用量. 在无穷远处的场完全相同使得空间得以紧致化. 考虑二维无限大平面 E_2,球面 S_2 与它相切(见图 7.3). 在法线的远端 O 画一直线与 S_2 和 E_2 分别交于 P 和 P',E_2 上的点 P'投影到 S_2 上的点 P. 平面 E_2 上任一点都在 S_2 上有一个投影点,它们是一一对应的. 但 E_2 上无穷远处所有的点都投影到 S_2 上的一点 O,此属例外. 因此,如果在无穷远处各点能够被等同起来(在那里场量都是相同的),E_2 即可以被紧致化为 S_2.

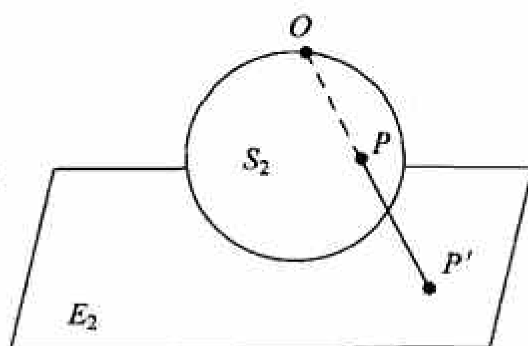


图 7.3 无限大平面 E_2 的紧致化

再考虑$\boldsymbol{\Omega}$ 的空间. $\boldsymbol{\Omega}$ 是具有一定方向(θ,ϕ)的单位矢量,它的代表点也是在 S_2 上. 一个具有有限作用量的场的位形$\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{x})$是一个光滑的(可微的)从欧氏时空 S_2 到序参量流形的 S_2 的映射. 图 7.4 画出一个自旋位形及它到紧致化 S_2 上的投影,图 7.5 画出映射. 定义欧氏空间自旋位形$\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{x})$的 Pontryagin 指标(或称环绕数,winding number),

$$Q = \frac{1}{8\pi}\int d^2 x \varepsilon^{ij} \boldsymbol{\Omega} \cdot (\partial_i \boldsymbol{\Omega} \times \partial_j \boldsymbol{\Omega}). \tag{7.5.2}$$

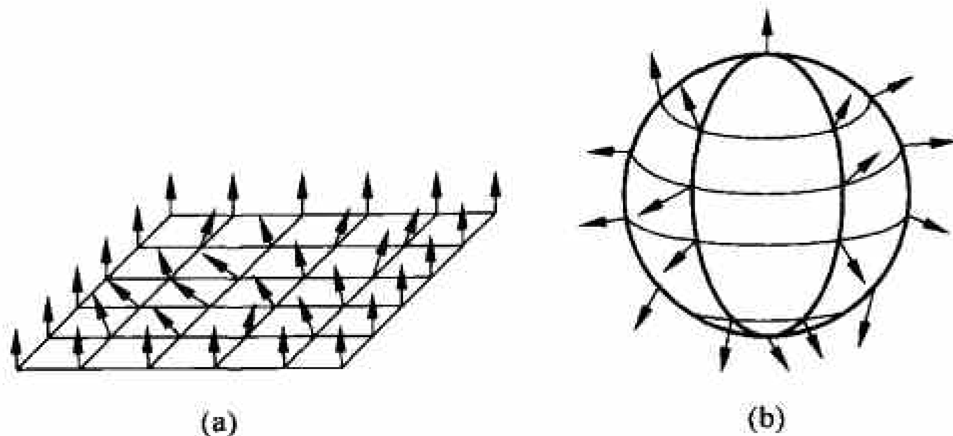


图 7.4 欧氏时空有限作用量的自旋位形(a)及其在紧致化空间 S_2 上的投影(b)

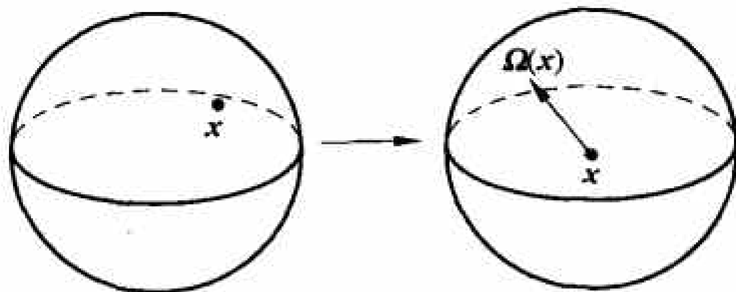


图 7.5 映射 $S_2 \xrightarrow{\boldsymbol{\Omega}(x)} S_2$

它表示当欧氏时空代表点遍及 S_2 后，$\boldsymbol{\Omega}$ 在序参量流形 S_2 上缠绕的次数①. 考虑瞬子所代表的位形 $\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{x})$，设在无穷远处场指向 S_2 的北极 $\boldsymbol{\Omega}_0$（图 7.6），而在原点处指向南极 $-\boldsymbol{\Omega}_0$. 将这个位形映射到场的流形空间 S_2，就成了磁单极场的样子（图 7.7）. 可以看到瞬子的 $Q=1$，而反瞬子的 $\boldsymbol{\Omega}$ 位形空间中"磁力线"却向内，$Q=-1$. 位形 $\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{x})$ 可以用其环绕数分类，即映射 $S_2 \xrightarrow{\boldsymbol{\Omega}(\boldsymbol{x})} S_2$ 分属拓扑性质不同的同伦类（homotopy class），其表征是环绕数 Q.

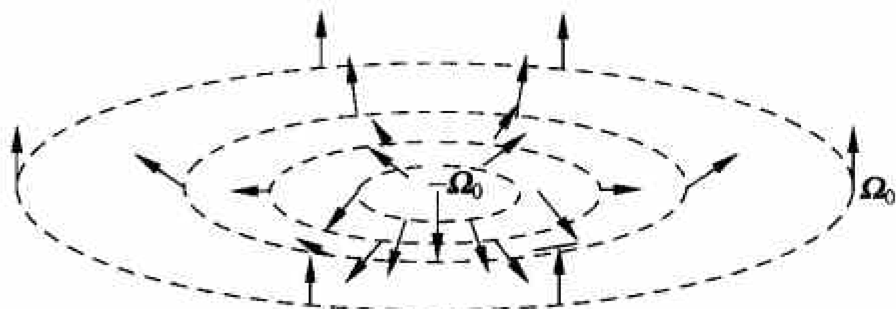


图 7.6　欧氏时空中瞬子位形

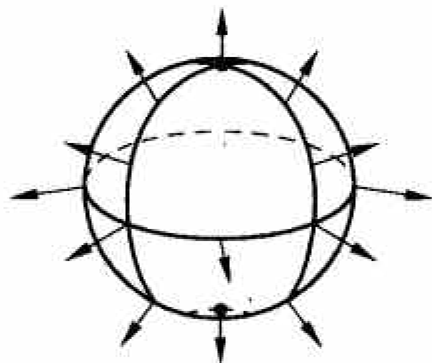


图 7.7　在 $\boldsymbol{\Omega}$ 流形空间其拓扑与磁单极相同

回到 Lagrangian 量密度（7.5.1）式. 拓扑项对作用量的贡献是相角，对路径积分的贡献则是相因子

$$e^{i\Theta Q} = e^{i2\pi s Q} = (-1)^{2sQ}.$$

因此，若 s 是整数，这个因子是 1. 对半整数 s，每个拓扑类贡献的符号取决于环绕数 Q. Q 为奇，因子为负；Q 为偶，因子为正. 它的物理就与整数自旋完全不同了. 这就是 Haldane 猜想的拓扑根源. I. Affleck[13] 讨论了一个质量产生机制，它对 $\Theta=0$ 成立，而对 $\Theta=\pi$ 不成立.

本节内容请参阅文献[12]pp. 105～109.

7.6　非 Abel 规范场的 Θ 真空

7.6.1　非 Abel 规范场

杨振宁和 R. L. Mills 在 1954 年提出了非 Abel 规范场理论[15]. 在电磁场理论中，定域规范不变性的要求完全确定了带电 Fermi 子和电磁场的相互作用. 他们将这个范例推广到 $SU(2)$ 场. 规范势 $A_\mu^a(x)$ 具有内部自由度 $a=1,2,3$，它们分别对应 $SU(2)$ 群的三个生成元 $\tau^a/2$，此处 τ^i 是 Pauli 矩阵. 和这个规范场相互作用的 Fermi 子场是二分量的 Dirac 自旋量，Fermi 子场的自由 Lagrange 量密度是

$$\mathscr{L}_0 = \bar{\psi}(x)(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x), \tag{7.6.1}$$

---

① 令 $x_1 x_2$ 代表在欧氏空间 S_2 上的坐标，例如 $x_1=\cos\theta$, $x_2=\varphi$. S_2 的面积元是 dx_1dx_2，在此面积元内，各点通过映射 $\boldsymbol{\Omega}(x_1,x_2)$ 到 $\boldsymbol{\Omega}$ 流形上的 S_2 占有的面积是 $dx_1dx_2\,\boldsymbol{\Omega}\cdot(\partial_1\boldsymbol{\Omega}\times\partial_2\boldsymbol{\Omega})$（由于 $\boldsymbol{\Omega}^2=1$，$\partial_1\boldsymbol{\Omega}$，$\partial_2\boldsymbol{\Omega}$，都和球面相切）. 当 (x_1, x_2) 遍布欧氏时间（面积 4π）时，$\boldsymbol{\Omega}$ 在流形 S_2 上扫过的面积是

$$\int dx_1dx_2\,\boldsymbol{\Omega}\cdot(\partial_1\boldsymbol{\Omega}\times\partial_2\boldsymbol{\Omega}) = \frac{1}{2}\int d^2x\,\epsilon^{ij}\,\boldsymbol{\Omega}\cdot(\partial_i\boldsymbol{\Omega}\times\partial_j\boldsymbol{\Omega})$$

而缠绕次数是 $\frac{1}{4\pi}\cdot\frac{1}{2}\int d^2x\,\epsilon^{ij}\boldsymbol{\Omega}\cdot(\partial_i\boldsymbol{\Omega}\times\partial_j\boldsymbol{\Omega})$.

它对整体 $SU(2)$ 变换

$$\psi(x) \to \psi'(x) = \exp\left(-\mathrm{i}\,\frac{\tau^a\theta^a}{2}\right)\psi(x) \tag{7.6.2}$$

是不变的，此处 $\theta^a\,(a=1,2,3)$ 是变换参数，它们与时空坐标无关（故称整体变换）. 但若要求理论对定域 $SU(2)$ 变换（θ^a 是时空坐标的函数 $\theta^a(x)$）也具有不变性时，就必须引入 $SU(2)$ 规范场 $A_\mu^a(x)$，它和 ψ 的相互作用形式完全由定域规范不变性质所确定：

$$\bar{\psi}(x)\left\{\mathrm{i}\gamma^\mu\left(\partial_\mu - \mathrm{i}g\,\frac{\tau^a A_\mu^a}{2}\right) - m\right\}\psi, \tag{7.6.3}$$

此处 g 是耦合常数. 在定域规范变换

$$U(x) = \exp\left(-\mathrm{i}\,\frac{\tau^a\theta^a(x)}{2}\right) \tag{7.6.4}$$

中，$\psi(x)$ 与 $A_\mu^a(x)$ 同时变换，即

$$\psi(x) \to \psi'(x) = U\psi(x), \tag{7.6.5}$$

$$A_\mu^a(x) \to A_\mu'^a(x) = A_\mu^a(x) + \varepsilon^{abc}\theta^b A_\mu^c(x) - \frac{1}{g}\partial_\mu\theta^a. \tag{7.6.6}$$

规范场强 $F_{\mu\nu}^a$ 和规范势 A_μ^a 的关系是

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g\varepsilon^{abc}A_\mu^b A_\nu^c. \tag{7.6.7}$$

在电磁理论（Abel 规范场）中 $F_{\mu\nu}$ 在规范变换中保持不变，但在非 Abel 规范场中 $F_{\mu\nu}^a$ 的变换是

$$F_{\mu\nu}^a \to F_{\mu\nu}^a + \varepsilon^{abc}\theta^b F_{\mu\nu}^c. \tag{7.6.8}$$

式(7.6.6)表明，在规范变换中除和电磁理论中类似的 $\partial_\mu\theta^a$ 项外，还因为 A_μ^a 是 $SU(2)$ 空间的矢量，而式(7.6.4)变换是这个空间的旋转变换，因此前二项正是这个旋转的效果. 同样 $F_{\mu\nu}^a$ 也是这个空间的矢量，故在式(7.6.8)变换中也体现了旋转的效果. 式(7.6.7)中最后一项的列入是关键性的，有了它才最后完成了理论的框架. 高度的对称要求（θ 是 x 的任意函数）导致了完全确定的相互作用. 这是理论极富吸引力的特点. 从弱电统一开始的标准模型就是以非 Abel 规范场作其基础的. 杨-Mills 场的提出是近代物理学中影响深远的奠基工作.

$SU(2)$ 规范场 A_μ^a 和 $SU(2)$ 二重态 Fermi 子场的定域规范不变 Lagrange 量密度是

$$\mathscr{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}^a F^{a\mu\nu} + \bar{\psi}\left\{\mathrm{i}\gamma^\mu\left(\partial_\mu - \mathrm{i}g\,\frac{\tau^a A_\mu^a}{2}\right) - m\right\}\psi. \tag{7.6.9}$$

为了避免重复书写指标，可以定义

$$A_\mu(x) \equiv A_\mu^a(x)\,\frac{\tau^a}{2}, \quad F_{\mu\nu}(x) = F_{\mu\nu}^a(x)\,\frac{\tau^a}{2}. \tag{7.6.10}$$

现在 $A_\mu(x)$，$F_{\mu\nu}(x)$ 都已是 2×2 矩阵. 式(7.6.6)、式(7.6.8)可以写作

$$\begin{aligned} A_\mu(x) &\to A_\mu'(x) = UA_\mu U^{-1} + \frac{\mathrm{i}}{g}U\partial_\mu U^{-1}, \\ F_{\mu\nu}(x) &\to F_{\mu\nu}'(x) = UF_{\mu\nu}U^{-1}. \end{aligned} \tag{7.6.11}$$

7.6.2 规范变换的等价类

在经典理论中，$F_{\mu\nu}=0$ 就是真空. 但相应的 A_μ 却不必须为 0，因为

$$A_\mu = \frac{\mathrm{i}}{g}U\partial_\mu U^{-1} \tag{7.6.12}$$

就是从 $A_\mu=0$ 经规范变换得来的. U 中的 $\theta^a(x)$ 是任意的，它同样描述 $F_{\mu\nu}=0$ 的状态. 规范

势式(7.6.12)称为“纯规范”(pure gauge).

由于规范变换有很大的自由,在讨论具体问题时往往加一些限制.确定规范势的时空0分量为0的称为时间规范(temporal gauge):

$$A_0(x)=0.\tag{7.6.13}$$

对式(7.6.13)仍能进行规范变换,只要U和时间无关就能保证变换后的规范势仍属时间规范:

$$A_0'=UA_0U^{-1}+\frac{\mathrm{i}}{g}U\partial_0U^{-1}=0.$$

因$A_0=0$,故第一个等号右侧第一项为0;又因U不含时间,故第二项也为0.在时间规范内的纯规范势有空间分量:

$$A_i(\boldsymbol{x})=\frac{\mathrm{i}}{g}U\partial_iU^{-1},\tag{7.6.14}$$

由于U与时间无关,故A_i只和空间坐标有关.

考虑$SU(2)$规范场,$SU(2)$群元素是

$$U=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\frac{\boldsymbol{\tau}}{2}},\tag{7.6.15}$$

此处$\theta^a=\theta\hat{\boldsymbol{n}}^a(a=1,2,3)$,$\hat{\boldsymbol{n}}$是单位矢量.$U$又可以写作

$$U=b_0+\mathrm{i}\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\tau},$$

此处

$$b_0=\cos\frac{\theta}{2},\quad \boldsymbol{b}=\hat{\boldsymbol{n}}\sin\frac{\theta}{2}.\tag{7.6.16}$$

一个群元素可以用4个参数$(b_0,\boldsymbol{b})$代表,它们之间有一个关系

$$b_0^2+\boldsymbol{b}^2=1.\tag{7.6.17}$$

因此,$SU(2)$的流形空间是在四维欧氏空间的单位球面S_3.与时间无关的$SU(2)$规范变换的一例是

$$U_1(\boldsymbol{x})=\frac{\boldsymbol{x}^2-\lambda^2}{\boldsymbol{x}^2+\lambda^2}+\mathrm{i}\frac{2\lambda\boldsymbol{\tau}\cdot\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^2+\lambda^2},\quad \lambda>0,\tag{7.6.18}$$

显然

$$U_n(\boldsymbol{x})=(U_1(\boldsymbol{x}))^n,\quad n=1,2,3,\cdots\tag{7.6.19}$$

也都是规范变换.用它仿式(7.6.14)构造成的纯规范势

$$A_i^{(n)}(\boldsymbol{x})=\frac{\mathrm{i}}{g}U_n(\boldsymbol{x})\partial_iU_n^{-1}(\boldsymbol{x})\tag{7.6.20}$$

具有有趣的拓扑性质.定义环绕数

$$n=\frac{\mathrm{i}g^3}{24\pi^2}\int\mathrm{d}^3x\,\mathrm{tr}\varepsilon^{ijk}A_i^{(n)}(\boldsymbol{x})A_j^{(n)}(\boldsymbol{x})A_k^{(n)}(\boldsymbol{x}),\tag{7.6.21}$$

$A_i(\boldsymbol{x})$等是2×2矩阵,tr是对矩阵求迹,可以证明n是整数.如果三维空间可以紧致化为四维空间的三维球面$S_3$①,规范变换式(7.6.19)就是从空间S_3上一点到$SU(2)$流形的S_3上一点的映射,n就是映射缠绕的次数.规范变换U_n及其相应的纯规范势$A_i^{(n)}$都是分为等价类的,每一类都用拓扑指标n所表征.从$A_n^i(\boldsymbol{x})$通过变换U_1,就变成$A_{n+1}^i(\boldsymbol{x})$:

① 因此要求$\lim\limits_{|\boldsymbol{x}|\to\infty}A_i(\boldsymbol{x})=0$.

$$
\begin{aligned}
A^i_{n+1}(\boldsymbol{x}) &= \frac{\mathrm{i}}{g}U_{n+1}\partial^i U_{n+1} = \frac{\mathrm{i}}{g}(U_1U_n)\partial^i(U_n^{-1}U_1^{-1}) \\
&= \frac{\mathrm{i}}{g}U_1\partial^i U_1^{-1} + U_1A^i_nU_1^{-1}.
\end{aligned}
\tag{7.6.22}
$$

用 $|n\rangle$ 代表第 n 类真空态，上式可以形式上写为

$$U_1 \mid n\rangle = \mid n+1\rangle. \tag{7.6.23}$$

以上的讨论基于文献[16].

7.6.3 Θ 真空

真实的物理真空是属哪一类的呢？真空必须是规范不变的，因此必须将各类真空叠加起来：

$$\mid \Theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\Theta} \mid n\rangle. \tag{7.6.24}$$

在 U_1 变换下，

$$U_1 \mid \Theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\Theta} \mid n+1\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Theta} \mid \Theta\rangle, \tag{7.6.25}$$

它是规范不变的，因为一个相因子不改变状态 $|\Theta\rangle$ 在 $(U_1)^n$ 变换下也是不变的，$|\Theta\rangle$ 被称为 Θ 真空. 为了了解 Θ 的意义，构成一个规范不变的算符编时乘积 $T(O_1\cdots O_p)$，计算它在两个不同值的 Θ 真空间的矩阵元，结果[16]这个矩阵元和 $\delta(\Theta-\Theta')$ 成正比. 即在两个以不同 Θ 值作为真空的"世界"间没有任何物理的交流. 在场论路径积分形式中，最核心的是计算"有外源 J"的真空-真空跃迁振幅①，即从 $t=-\infty$ 的真空到 $t=\infty$ 的真空的跃迁振幅为

$$
\begin{aligned}
\langle\Theta \mid \Theta\rangle^J &= \sum_{m,n} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\Theta}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\Theta}\langle m \mid n\rangle^J \\
&= \sum_{\nu} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\nu\Theta}\sum_{n}\langle n+\nu \mid n\rangle^J,
\end{aligned}
\tag{7.6.26}
$$

此处用 $m=n+\nu$ 作了置换. 式中 $\langle n+\nu|n\rangle$ 是 $t=-\infty$ 环绕数 n 的真空到 $t=+\infty$ 环绕数 $n+\nu$ 真空的跃迁. 从非 Abel 规范场的瞬子解看，正好是它们把不同环绕数的真空联系在一起的. 第 5 章讨论的扭折解，是从在 $\tau=-\infty$ 的稳定位置穿过势垒到 $\tau=+\infty$ 的另一个稳定位置②. 不同环绕数的真空，拓扑性质不同，就像它们之间有势垒一样，靠瞬子解实现隧穿. 从 $t=-\infty$ 的 $|\Theta\rangle$ 到 $t=+\infty$ 的 $|\Theta\rangle$，它们的组成部分（不同环绕数的真空），就是借瞬子解实现的如式(7.6.26)所示的跃迁，而这个跃迁振幅正包括了体系的全部物理. 体系的具体性质是通过路径积分的"被积函数" $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}S}$ 或 e^{-S_E} 反映的. 但这里的 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\nu\Theta}$ 因子等于在作用量 S 上加了一项. 具体分析如下.

回顾一维铁磁链 Lagrange 量密度中的拓扑项式(7.3.19)，它和一个流 K^μ 的散度相联系. 根据 Bardeen 恒等式[16]，规范场强的对偶 $\widetilde{F}_{a\mu\nu}=\frac{1}{2}\epsilon_{\mu\nu\lambda\rho}F^{\lambda\rho}_a$ 和 $F^{\mu\nu}_a$ 的标量积一定是一个流的四维散度：

---

① 外源 J 的存在是技术性的，是为了将来对它取微商得到 Green 函数.

② 参阅第 5 章 5.2 节.

$$F_a^{\mu\nu}\widetilde{F}_{a\mu\nu}=\frac{1}{2}\varepsilon_{\alpha\beta\mu\nu}F_a^{\mu\nu}F_a^{\alpha\beta}=\partial^\mu K_\mu. \tag{7.6.27}$$

而对 $SU(2)$，

$$K_\mu=\varepsilon_{\mu\alpha\beta\gamma}A_a^\alpha\left[F_a^{\beta\gamma}-\frac{g}{3}\varepsilon_{abc}A_b^\beta A_c^\gamma\right], \tag{7.6.28}$$

此处 a,b,c 是 $SU(2)$指标 1,2,3；μ,α,β,γ 是时空指标.将式(7.6.27)作四维体积积分并用 Gauss 定理，有

$$\int d^4xF_a^{\mu\nu}\widetilde{F}_{a\mu\nu}=\int d^4x\partial^\mu K_\mu=\int_S d\sigma^\mu K_\mu. \tag{7.6.29}$$

包围四维空间的可以看做是三维柱面，两端是 $t=\pm\infty$ 的三维空间，而柱面都是在空间无穷远处.在无穷远处是真空，$F_a^{\beta\gamma}=0$，而在时间规范中 $A_a^0=0$.因此在无穷远处式(7.6.28)的 K_μ 只有 0 分量不为 0：

$$K_0=-\frac{g}{3}\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{abc}A_a^iA_b^jA_c^k=\frac{4}{3}\mathrm{i}g\varepsilon_{ijk}\mathrm{tr}A^iA^jA^k. \tag{7.6.30}$$

在积分式(7.6.29)中，柱面上积分为 0，因为 K_μ 没有空间分量，只有在 $t=\pm\infty$ 处的积分不为 0，故有

$$\int d^4xF_a^{\mu\nu}\widetilde{F}_{a\mu\nu}=\int d^3xK_0\Big|_{t=-\infty}^{t=+\infty}$$

和式(7.6.21)定义的 n 比较，并用式(7.6.30)，有

$$\frac{g^2}{32\pi^2}\int d^4xF_a^{\mu\nu}\widetilde{F}_{a\mu\nu}=n(+\infty)-n(-\infty)=\nu. \tag{7.6.31}$$

因此式(7.6.26)中的 $e^{i\Theta}$ 因子，就相当于在路径积分的 e^{iS} 因子的作用量 S 中贡献一项

$$S_\Theta=\Theta\frac{g^2}{32\pi^2}\int d^4xF_a^{\mu\nu}\widetilde{F}_{a\mu\nu},$$

或对 Lagrange 密度贡献一项

$$\mathscr{L}_\Theta=\Theta\frac{g^2}{32\pi^2}F_a^{\mu\nu}\widetilde{F}_{a\mu\nu}. \tag{7.6.32}$$

前面已经指出，它和 $\partial^\mu K_\mu$ 四维散度成正比，因此对运动方程没有贡献，也没有微扰效应.在粒子物理中，强相互作用理论量子色动力学是用 $SU(3)$规范场构成的，它的真空也具有一个 Θ 值.这一项的存在既破坏 P(宇称)、T(时间反演)又破坏 CP(C 是粒子-反粒子共轭)，这称为强 CP 破坏问题.但在强相互作用中 CP 守恒的检验是极为精确的，因此 Θ 的上限应是极小的.能否在理论上得到 $\Theta=0$ 呢？有一些尝试，但还没有满意的解决.

7.6.3 节内容请参阅文献[16].

7.7　拓扑项与反常

在量子电动力学中，电子质量建立了理论的尺度，$\frac{\hbar}{mc}$ 定义长度的尺度，$\frac{\hbar}{mc^2}$ 定义时间的尺度，mc 和 mc^2 建立了动量和能量的尺度.对于量子色动力学(QCD)，夸克是无质量的①.

① 夸克质量只是在弱电作用中对称自发破缺的结果，在强作用的量子色动力学中，夸克是无质量的.

而在 Lagrange 量密度中，也没有任何有量纲的参数. 这样的理论称为尺度不变(scale invariant)理论. 但在计算量子修正时需要进行重正化. 重正化理论引入了一个质量(记为 M)，尽管在理论中开始时并没有质量或其他有量纲的量. 这是可重正化理论的一个特点. M 的值并不能由理论给出，例如，在 QCD 中夸克和胶子相互作用的耦合常数由下式给出：

$$\alpha_s(Q^2) = \frac{4\pi}{\left(11 - \frac{2}{3}n_f\right)\ln\frac{Q^2}{\Lambda^2}}, \tag{7.7.1}$$

α_s 和 QED(量子电动力学)中的精细结构常数 α 相当，Q^2 是物理过程中四维动量传输的平方，n_f 是参与过程的夸克味数. 式中没有任意参数，Λ 就等效于重正化条件引入的参数. 它的值必须由实验确定，结果是 150～200MeV. 在此，经典 Lagrange 量是尺度不变的，只是计算量子修正时通过重正化引入了质量尺度，从而破坏了尺度不变性. 这种现象称为量纲嬗变(dimensional transmutation). 经典对称性被量子处理(通过路径积分或场论微扰论)所破坏，对称性就被称为是反常的(anomalous).

反常的存在有重要的物理后果. 上面的例子给出的是"跑动的耦合常数"(the running coupling constant)，即耦合常数实际上与物理过程的 Q^2 尺度有关. QCD 的跑动耦合常数在 Q^2 足够大时会变得较小，这称为"渐近自由"(asymptotic freedom). 因此对高能大动量传输过程可以使用微扰论，"微扰量子色动力学"已得到有力的实验支持. 另一个例子是手征反常，它导致 Wess-Zumino 项. 考虑 Dirac Fermi 子与电磁场相互作用，Lagrange 量密度是

$$\mathscr{L} = \bar{\psi}(\gamma^\mu(\partial_\mu + \mathrm{i}A_\mu) + \mathrm{i}m)\psi. \tag{7.7.2}$$

它对整体相变换(λ 为常数)

$$\psi \to \psi' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda}\psi \tag{7.7.3}$$

是不变的. 在场论中，一个对称性相应于一个守恒流，称为 Noether 流. 对应式(7.7.3)变换的守恒流正是 Fermi 子流

$$J_\mu = \mathrm{i}\bar{\psi}\gamma_\mu\psi, \tag{7.7.4}$$

它满足

$$\partial^\mu J_\mu = 0. \tag{7.7.5}$$

守恒条件式(7.7.5)是一个连续方程，

$$\frac{\partial}{\partial t}J_0 - \nabla\cdot\boldsymbol{J} = 0. \tag{7.7.6}$$

对空间积分并用 Gauss 定理以及场在无穷远处为 0，就得到

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \mathrm{d}^3 x J_0 = 0, \tag{7.7.7}$$

这就是粒子数(电荷)守恒. 再考虑整体手征变换

$$\psi \to \psi' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\nu\gamma_5}\psi, \tag{7.7.8}$$

其中 ν 是常数(相当于式(7.7.3)中的 λ)，γ_5 是 Dirac 矩阵，$\gamma_5 = \mathrm{i}\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$. 相应的流

$$J_\mu^5 = \mathrm{i}\bar{\psi}\gamma_\mu\gamma_5\psi \tag{7.7.9}$$

满足

$$\partial^\mu J_\mu^5 = -2m\bar{\psi}\gamma_5\psi, \tag{7.7.10}$$

因此，只在 $m=0$ 极限下，J_μ^5 才是守恒流，$\mathscr{L}$ 才对手征变换不变. 以上的对称性是经典 Lagrange 量(尚未对 ψ 进行二次量子化)的性质. Adler, Bell, Jackiw[17,18] 用微扰论证明，如

果考虑了二次量子化的量子效应，则有

$$\partial^\mu J_\mu = 0,$$
$$\partial^\mu J_5 = -2m\bar{\psi}\gamma_5\psi + \frac{\mathrm{i}}{8\pi^2}F_{\mu\nu}\widetilde{F}^{\mu\nu}. \tag{7.7.11}$$

即使在 $m=0$ 极限下，手征相变换的经典对称性也被量子效应所破坏. 藤川(K. Fujikawa)[19,20]指出，路径积分的测度在手征相变换下的 Jacobi 行列式与电磁势 A_μ 有关，不是规范不变的. 他不用微扰论而直接导出了反常关系式(7.7.11). 将以上 QED 的反常推广到 QCD: ψ 是 3 分量的 Dirac 自旋量 $\psi^a(a=1,2,3)$，规范势和规范场强都是 3×3 矩阵 $(A_\mu)^a_b$，$(F_{\mu\nu})^a_b$. 这时反常关系是

$$\partial^\mu J^5_\mu = \partial^\mu \mathrm{i}\bar{\psi}^a\gamma_\mu\gamma_5\psi^a = \frac{\mathrm{i}}{8\pi^2}\mathrm{tr}F_{\mu\nu}\widetilde{F}^{\mu\nu}. \tag{7.7.12}$$

将第二等号右方移至第一等号左方并改写，得

$$\partial^\mu\left(J^5_\mu - \frac{\mathrm{i}}{4\pi^2}W_\mu\right) = 0, \tag{7.7.13}$$

此处

$$W_\mu = \epsilon_{\mu\nu\sigma\tau}\mathrm{tr}\left(A^\nu\partial^\sigma A^\tau + \frac{2}{3}\mathrm{i}A^\nu A^\sigma A^\tau\right). \tag{7.7.14}$$

形式上这可以定义相应的守恒荷

$$Q'_5 = \int \mathrm{d}^3x\left(J^5_0 - \frac{\mathrm{i}}{4\pi^2}W_0\right), \tag{7.7.15}$$

但实际上 Q'_5 不是规范不变的，因此物理上不存在这样的守恒量. 在规范变换下

$$A_i \to A'_i = -\mathrm{i}U\partial_i U^\dagger + UA_iU^\dagger \tag{7.7.16}$$

手征荷的变化是

$$\Delta Q'_5 = -\frac{\mathrm{i}}{4\pi^2}\int \mathrm{d}^3x\,\epsilon_{ijk}\left[\frac{1}{3}\mathrm{tr}(U\partial_iU^\dagger)(U\partial_jU^\dagger)(U\partial_kU^\dagger) + \mathrm{i}\partial_i\mathrm{tr}(U^\dagger\partial_jUA_k)\right]. \tag{7.7.17}$$

方括弧中第二项是三维散度，可以用 Gauss 定理转为在无穷远处的表面积分，因而对 $\Delta Q'_5$ 没有贡献. 第一项和规范势无关，而它正是 Pontryagin 指数或环绕数式(7.6.20)、式(7.6.21). 因此荷 Q'_5 在环绕数 $n=0$ 的规范变换下是不变的，但在拓扑非平凡(环绕数不为 0)的规范变换下要变一个整数 $2n$.

以上讨论的是整体对称性的反常，反常的存在有物理后果. 例如，Abel 手征反常正好给出 $\pi^0\to2\gamma$ 的衰变率. 从式(7.7.11)可见，反常项正好使两个光子(等效 π^0)和$\partial^\mu J^5_\mu$ 耦合起来. Fermi 子是带电的夸克. 理论的结果可以直接和实验比较. 其结果是，不仅要计入夸克的味(u,d)，还要计入夸克不同的色$(N_c=3)$. 这时理论和实验就符合很好，这对夸克的色自由度是很好的支持. 反常尺度对称性导致跑动耦合常数，前面已讨论过.

局域对称性的反常，例如局域手征反常的存在，对理论会带来危险. 因为它破坏局域规范不变性，使理论丧失可重正化性，从而不能成为自洽的理论. 在此情况下，就必须研究反常抵消的可能性. 这对于选什么样的对称群和理论中 Fermi 子有多少类都会带来限制. 这样，反常从对理论造成危险变为建立理论的一个积极因素：不是任何一个群都可以用来建立物理的理论，往往选择是有限的. 这在大统一和超弦理论的研究中都有应用.

参考文献

[1] Madelung O. Introduction to Solid State Theory. Translated by Taylor B. C. Berlin: Springer, 1978.

[2] Caspers W J. Spin Systems. Singapore: World Scientific, 1989.

[3] Affleck I J. Phys Condens Matter, 1989, 1: 3047.

[4] Goldstone J. Nuovo Cimento, 1961, 19: 154.

[5] Goldstone J, Salam A, Welnberg S. Phys Rev, 1962, 127: 965.

[6] Bethe H A. Z Phys, 1931, 71: 205.

[7] Lowenstein J. In: Recent Advances in Field Theory and Statistical Mechanics. Zuber L B, Stora R, eds. Amsterdam, North Holland, 1984.

[8] Haldane F D M. Phys Lett, 1983, A 93: 464.

[9] Haldane F D M. Phys Rev Lett, 1983, 50: 1153.

[10] Haldane F D M. J App Phys, 1985, 57: 3359.

[11] Lieb E H, Schultz T, Mattis D J. Ann Phys(N. Y.), 1961, 16: 407.

[12] Fradkin E. Field Theories of Condensed Matter Systems. Redwood City: Addison-Wesley, 1991.

[13] Coleman S. Comm Math Phys, 1973, 31: 259.

[14] Affleck I, Lieb E H. Lett Math Phys, 1986, 12: 57.

[15] Yang C N, Mills R L. Phys Rev, 1954, 96: 191.

[16] Peccei R. In: The Strong CP Problem. CP Violations. Jarlskog C, ed. Singapore: World Scientific, 1989.

[17] Adler S L. Phys Rev, 1969, 177: 2426.

[18] Bell J S, Jackiw R. Nuovo Cimento, 1969, 60A: 47.

[19] Fujikawa K. Phys Rev, 1980, D21: 2848.

[20] Fujikawa K. Phys Rev lett, 1979, 42: 1195.

第 8 章
腔量子电动力学，van der Waals 力和 Casimir 效应

腔量子电动力学[1,2,3]（简称腔 QED）是量子光学的一个领域，它研究单个原子和一些光子在电磁谐振腔中的相互作用. 近十几年来在原子和场两方面都观察到崭新的性质. 在原子周围的谐振腔能改变（抑制或增强）原子的自发辐射率和腔的耦合能移动原子能级. 与此相对应的是：腔中电磁场（光子）也由于和原子的耦合呈现出非经典的性质. 由于高品质因数腔和原子束技术的发展，使得腔中光子数的量子非破坏性测量成为可能. 在高 Q（品质因数）腔内能够产生介观的场的相干（Schrödinger 猫）. 8.1～8.6 节讨论腔量子电动力学一些最基础的内容.

因果性原理在物理学问题中都有体现. 例如介质中电场 $\boldsymbol{E}(t)$ 随时间变化，则电位移矢量 $\boldsymbol{D}(t)$ 只能和 t 时间以前的 $\boldsymbol{E}$ 有关，又如在入射波到达散射中心之前不能有散射波存在等，这些要求都在理论中有所反映. 例如以 $\boldsymbol{D}(\omega)$ 及 $\boldsymbol{E}(\omega)$ 代表 $\boldsymbol{D}$ 及 $\boldsymbol{E}$ 矢量的 Fourier 分量，则它们之间的关系是 $\boldsymbol{D}(\omega)=\varepsilon(\omega)\boldsymbol{E}(\omega)$，$\varepsilon$ 为介电常数. 上述因果关系将反映在称为广义极化率 $\alpha(\omega)=\varepsilon(\omega)-1$ 的解析性质中，此处 $\alpha(\omega)$ 是复变量 ω 的函数. 反映解析性质的关系称为色散关系，是 Kramers 和 Krönig 在 1927 年研究光的色散因果原理时得到的. 广义极化率 $\alpha(\omega)$ 是表征体系对外来扰动响应的性质，对它的研究导致对物理体系有广泛应用的涨落-耗散定理. 上述内容在 8.7 节中讨论.

中性原子间的作用力称 van der Waals 力. 原子的电偶极矩平均值为 0，这是因为原子的定态具有确定的宇称. 但由于涨落原子可以有偏离平均值的自发偶极矩，而这个偶极矩在另一原子处产生的电场使原子极化，产生电偶极矩. 这种偶极-偶极相互作用便是 van der Waals 力的来源. 涨落-耗散定理便在研究电磁场涨落中得到了应用. 研究的结果是，这种力的势能在原子间距 R 不太大时和 R^6 成反比，而当 R 大时需考虑推迟相互作用，此时势能和 R^7 成反比. 这种比例规律和原子结构无关，Casimir 一直在思索规律普遍性的根源，在他向 N. Bohr 请教时 Bohr 提到可能和零点能有关. 这里 Bohr 指的是电磁场真空涨落的能量，Casimir 用这个概念果然导出了 R^{-7} 规律. 被这个结果所鼓舞 Casimir 进而研究了两个不带电金属平板平行放置时板间的作用力，力的来源是因板间的电磁场的零点振荡和开放空间的不同，这称为 Casimir 效应. 零点振荡在解释 Lamb 能移方面起了重要作用. 对 Casimir 效应，Lamb 能移和 van der Waals 力的诠释问题，即是否一定要涉及零点振荡，也是一个很有兴趣的问题. 8.8～8.13 节讨论这些问题.

8.1 辐射场与原子相互作用

关于辐射场与原子相互作用，在量子力学教科书中都有系统叙述. 对辐射场的状态，多用平面波本征态展开. 在腔量子电动力学中，电磁场局限于一定边界条件，因此需作一定修改. 此处仅对理论的主要步骤予以介绍，以期在过渡到腔量子电动力学时便于比较①. 中间详细推导均从略.

8.1.1 原子中电子场的量子化

原子中电子的正交归一本征态 ψ_j 是 Schrödinger 方程的解，相应本征值为 E_j：

$$\mathcal{H}_0\psi_j(\boldsymbol{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + eV\right)\psi_j(\boldsymbol{r}) = E_j\psi_j(\boldsymbol{r}). \tag{8.1.1}$$

在二次量子化理论中电子场算符 $\hat{\psi}$ 用 ψ_j 展开，系数是 j 态电子的消灭算符：

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r}) = \sum_j c_j\psi_j(\boldsymbol{r}). \tag{8.1.2}$$

它的厄密共轭是

$$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}) = \sum_j c_j^\dagger\psi_j^*(\boldsymbol{r}), \tag{8.1.3}$$

此处 $c_j^\dagger$ 是 j 态电子的产生算符. 电子场的 Hamilton 量算符是

$$H_0 = \int\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\mathcal{H}_0\hat{\psi}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r. \tag{8.1.4}$$

将式(8.1.2)、式(8.1.3)代入并用 ψ_j 的正交归一性质，得

$$H_0 = \sum_j E_j c_j^\dagger c_j, \tag{8.1.5}$$

即 $c_j^\dagger c_j$ 是位于 j 态上的电子数算符. 电子场的真空态 $|0\rangle$ 定义为

$$c_j\,|0\rangle = 0. \tag{8.1.6}$$

在 j 态上有一个电子的状态是 $c_j^\dagger|0\rangle$. Fermi 子算符 $c_i, c_j^\dagger$ 满足反对易关系

$$\begin{aligned}\{c_i, c_j^\dagger\} &= c_ic_j^\dagger + c_j^\dagger c_i = \delta_{ij},\\ \{c_i, c_j\} &= \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0.\end{aligned} \tag{8.1.7}$$

它们导致场算符间的反对易关系

$$\begin{aligned}\{\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}(\boldsymbol{r}')\} &= \delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'),\\ \{\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}(\boldsymbol{r}')\} &= 0.\end{aligned} \tag{8.1.8}$$

8.1.2 辐射场的量子化

辐射场——真空中的电磁场——可以用矢量势 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$描述. 采用 Coulomb 规范，辐射场的标量势设定为 0②. 因此场强是

---

① 可参阅 Merzbacher E. Quantum Mechanics[M]. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 1970, 22 章以及文献[1], [2].

② 原子中电子感受到的静电场用 $V(\boldsymbol{r})$ 描述，它是"外场"，与辐射场无关. V 是不量子化的，而 $\boldsymbol{A}$ 是量子化的. 见式(8.1.11).

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{B} &= \nabla\times\boldsymbol{A}, \\ \boldsymbol{E} &= -\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}. \end{aligned}\right\} \tag{8.1.9}$$

Lorentz 条件在无标量势情况就是

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0. \tag{8.1.10}$$

量子化的辐射场矢量势是

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \sum_k \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k}\right)^{1/2}\left[a_k\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_k t} + a_k^\dagger\boldsymbol{u}_k^*(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_k t}\right], \tag{8.1.11}$$

此处 $a_k, a_k^\dagger$ 分别是 k 态光子的消灭、产生算符. $\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{r})$是复数矢量模式函数，它满足

$$\left(\nabla^2 + \frac{\omega_k^2}{c^2}\right)\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{r}) = 0, \tag{8.1.12}$$

并满足横波条件

$$\nabla\cdot\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{r}) = 0. \tag{8.1.13}$$

式(8.1.11)中圆括弧中的归一化因子的选择，使 $a, a^\dagger$ 成为无量纲的，并将导致辐射场光子图景的式(8.1.20)，$\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{r})$组成正交归一完备集，

$$\int \boldsymbol{u}_k^*(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{u}_{k'}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3 r = \delta_{kk'}. \tag{8.1.14}$$

模式函数满足物理系统的边界条件. 对边长为 L 的正方体，平面波模式函数是

$$\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{r}) = L^{-3/2}\,\hat{\boldsymbol{e}}^{(\lambda)}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}, \tag{8.1.15}$$

其中$\hat{\boldsymbol{e}}^{(\lambda)}$是极化单位矢量，$\lambda=1,2$ 是极化指标，$\hat{\boldsymbol{e}}^{(1)}, \hat{\boldsymbol{e}}^{(2)}$ 与波矢 $\boldsymbol{k}$ 互相垂直，这是横波条件式(8.1.13)所要求的，并有 $k^2=\omega_k^2/c^2$. 边界条件给出

$$\left.\begin{aligned} & k_x = \frac{2\pi n_x}{L},\quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L},\quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L}, \\ & n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots. \end{aligned}\right. \tag{8.1.16}$$

模式 k 由极化指标及波矢 $\boldsymbol{k}$ 表征. $a_k, a_k^\dagger$ 是 Bose 子算符，满足对易关系

$$[a_k, a_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'},\quad [a_k, a_{k'}] = [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger] = 0. \tag{8.1.17}$$

辐射场的真空态$|0\rangle$定义为 $a_k|0\rangle=0$，有一个 k 态光子的态是 $a_k^\dagger|0\rangle$，等等. 式(8.1.11)给出电场

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = \mathrm{i}\sum_k (2\pi\hbar\omega_k)^{1/2}\left[a_k\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_k t} - a_k^\dagger\boldsymbol{u}_k^*(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_k t}\right]. \tag{8.1.18}$$

将式(8.1.18)及相应的 $\boldsymbol{B}$ 代入辐射场能量

$$H_{\text{rad}} = \frac{1}{8\pi}\int(\boldsymbol{E}^2 + \boldsymbol{B}^2)\mathrm{d}^3 r, \tag{8.1.19}$$

就得到

$$H_{\text{rad}} = \sum_k \hbar\omega_k\left(a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2}\right). \tag{8.1.20}$$

8.1.3　电子场与辐射场相互作用，自发辐射率

两个场的相互作用可以从 Hamilton 量式(8.1.1)推广而来：

$$\mathscr{H} = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + eV(\boldsymbol{r}) = \mathscr{H}_0 - \frac{e}{m}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}, \tag{8.1.21}$$

此处 $\boldsymbol{A}$ 就是辐射场的矢量势. 在上式中用了 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$,并弃去了 $\boldsymbol{A}^2$ 项,因为不考虑二光子的过程. 量子化的辐射场与原子相互作用的 Hamilton 量是

$$H_{\text{int}}=\int\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r})\left(-\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}\right)\hat{\psi}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r, \tag{8.1.22}$$

体系的总 Hamilton 量是

$$H=H_0+H_{\text{rad}}+H_{\text{int}}, \tag{8.1.23}$$

H_0 与 H_{rad} 分别由式(8.1.4)和式(8.1.19)给出. 将式(8.1.2)和式(8.1.11)(用 $\boldsymbol{A}(0)$)代入式(8.1.22),得

$$H_{\text{int}}=\sum_{i,j,k}c_i^{\dagger}c_j(g_{ij}^k a_k+g_{ij}^{k*}a_k^{\dagger}), \tag{8.1.24}$$

此处 i,j 是电子的状态指标,k 是辐射场模式指标,g_{ij}^k 代表电子与辐射场的耦合:

$$g_{ij}^k=-\frac{e}{m}\left(\frac{2\pi\hbar}{\omega_k V}\right)^{1/2}\int\psi_i^*\boldsymbol{u}_k\cdot\boldsymbol{p}\psi_j\mathrm{d}^3r, \tag{8.1.25}$$

而式(8.1.24)对 k 的求和是指对极化指标以及波矢 $\boldsymbol{k}$ 的求和. 式(8.1.25)中的 V 是体系的体积,$V=L^3$. H_{int} 导致原子在发射或吸收光子 k 同时自 j 态跃迁到 i 态. 由于在光学区光子的波长比原子的尺度大很多(原子线度≈1Å,光子波长≈10^3Å),可以将式(8.1.25)积分中的平面波模式函数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ 代以 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}$,此处 $\boldsymbol{R}$ 为原子质心坐标. 将坐标原点定在原子质心,这个因子就是 1. 式(8.1.25)中的积分就变为

$$\begin{aligned}\int\psi_i^*\boldsymbol{p}\psi_j\mathrm{d}^3r&=\frac{\mathrm{i}m}{\hbar}\int\psi_i^*[\mathscr{H}_0,\boldsymbol{r}]\psi_j\mathrm{d}^3r\\&=\frac{\mathrm{i}m}{\hbar}(E_i-E_j)\int\psi_i^*\boldsymbol{r}\psi_j\mathrm{d}^3r,\end{aligned}$$

并有

$$g_{ij}^k=\mathrm{i}\left(\frac{2\pi\hbar}{\omega_k V}\right)^{1/2}\omega_{ji}\,\hat{\boldsymbol{e}}^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{d}_{ij}, \tag{8.1.26}$$

此处

$$\omega_{ji}=\frac{E_j-E_i}{\hbar}, \tag{8.1.27}$$

$$\boldsymbol{d}_{ij}=\int\psi_i^*e\boldsymbol{r}\psi_j\mathrm{d}^3r, \tag{8.1.28}$$

分别是原子跃迁角频率以及电偶极矩阵元. 在式(8.1.26)中并未设 $\omega_k=\omega_{ji}$,这是因为在腔量子电动力学中将会有"失谐",即有时有目的地将腔的共振频率 ω_k 调到对 ω_{ji} 有所偏离.

在自由空间的辐射,有 $\omega_k=\omega_{ji}$,此时有

$$g_{ij}^k=\mathrm{i}\left(\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V}\right)^{1/2}\hat{\boldsymbol{e}}_k^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{d}_{ij}. \tag{8.1.29}$$

因子 $\left(\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V}\right)^{1/2}$ 是真空电场强度的均方根值 $\mathscr{E}_0$. 由于电场强度算符(式(8.1.18))与光子数算符 $a_k^{\dagger}a_k$ 不对易,因此对辐射场的真空态(根据 $a_k|0\rangle=0$,真空态是光子数的本征态,本征值为 0)$\boldsymbol{E}$ 的值是不确定的. 它不可能为 0,但它的平均值为 0,通常这被称为"真空涨落". $\boldsymbol{E}$ 的各分量也不对易. 从式(8.1.20)看,辐射场每个模式都有零点能 $\frac{1}{2}\hbar\omega_k$. 真空能量密度中

$\frac{1}{8\pi}\boldsymbol{E}_0^2$ 占有一半，因此

$$\frac{1}{8\pi}\langle \boldsymbol{E}_0^2\rangle = \frac{1}{2}\frac{\frac{1}{2}\hbar\omega}{V},$$

即有

$$\mathscr{E}_0 = \langle \boldsymbol{E}_0^2\rangle^{1/2} = \left(\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V}\right)^{1/2}. \tag{8.1.30}$$

经过辐射场的量子化，自发辐射的物理过程就清楚了．电子是由于和真空场的涨落（$\langle \boldsymbol{E}\rangle = 0$，$\langle \boldsymbol{E}^2\rangle \neq 0$）的作用而发生跃迁的．自由空间的辐射的特点是光子的波矢不受任何局限．式（8.1.16）在 $L\to\infty$ 极限下 $\boldsymbol{k}$ 的分量成为连续的．此时模式的态密度是

$$\rho_0(\omega) = \frac{\omega^2 V}{\pi^2 c^3}. \tag{8.1.31}$$

根据 Fermi 的"黄金规则"，自发辐射单位时间的发射几率 Γ_0 是[①]

$$\Gamma_0 = 2\pi\left(\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V}\right)|\boldsymbol{d}_{ij}|^2\frac{\rho_0}{3} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}|\boldsymbol{d}_{ij}|^2. \tag{8.1.32}$$

这是熟知的偶极辐射公式．

下面将讨论腔量子电动力学．模式函数记为 $\boldsymbol{f}$，它满足腔的边界条件．由于原子尺度甚小于光子波长，在积分式（8.1.25）中可以将 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{R})$ 从积分中提出．相当于式（8.1.29）的耦合是

$$g_{ij}^k = \mathrm{i}\left(\frac{2\pi\hbar\omega_k}{\mathscr{V}}\right)^{1/2}\boldsymbol{f}_k(\boldsymbol{R})\cdot\boldsymbol{d}_{ij}, \tag{8.1.33}$$

此处 $\mathscr{V}$ 是模式的有效体积，

$$\mathscr{V} = \int |\boldsymbol{f}_k(\boldsymbol{r})|^2 \mathrm{d}^3 r. \tag{8.1.34}$$

式（8.1.24）对自由空间辐射场和腔内辐射场与原子的相互作用都适用．对前者 g_{ij}^k 由式（8.1.29）给出，对后者由式（8.1.33）给出．

8.2 Jaynes-Cummings 模型

Jaynes-Cummings 模型的出发点是二能级原子和腔中单模的耦合，耦合是共振的或接近共振的．这个模型是理想化的，但在实际条件下可以用高激发态原子和高 Q 值超导腔耦合，使场的模式和 Rydberg 态 $|e\rangle\to|g\rangle$ 跃迁匹配或接近匹配来逼近．共振耦合排斥非共振的原子跃迁和非共振场模式．如制备一种"圆"Rydberg 态，则近似条件更好．这是 $l=n-1$ 的态．由于电偶极辐射的选择规则 $|\Delta l|=1$，这个态只能跃迁到最邻近的（$\Delta n=1$）态．例如 $|l\rangle$ 为 $n=50$，$l=49$，通过偶极辐射它跃迁到 $n=49$，$l=48$．更低的态 l 值更小，不满足偶极选择规则．采用 Rydberg 态可以有足够大的电偶极矩（$n=50$ 时原子"半径"为基态的 2 500 倍）保证强的耦合．

① 在 ρ_0 中已考虑了两种极化态．在 $|g_{ij}^k|^2$ 中的 $|\hat{e}\cdot\boldsymbol{d}|^2$ 因子对极化矢量方向的平均给出因子 1/3．

对二能级原子，令 $\omega_0=\frac{1}{\hbar}(E_e-E_g)$，并令 $E_e=\frac{1}{2}\hbar\omega_0$，$E_g=-\frac{1}{2}\hbar\omega_0$. 定义算符

$$\left.\begin{aligned} b&=|g\rangle\langle e|, \\ b^{\dagger}&=|e\rangle\langle g|, \end{aligned}\right\} \tag{8.2.1}$$

它们分别是 $|e\rangle\to|g\rangle$ 以及 $|g\rangle\to|e\rangle$ 的跃迁算符. 式(8.2.1)给出

$$bb^{\dagger}=|g\rangle\langle g|, b^{\dagger}b=|e\rangle\langle e|.$$

又因 $|e\rangle$，$|g\rangle$ 组成完备集，有

$$bb^{\dagger}+b^{\dagger}b=1. \tag{8.2.2}$$

原子-场体系的 Hamilton 量是

$$H=\frac{\hbar\omega_0}{2}(b^{\dagger}b-bb^{\dagger})+\hbar\omega\left(a^{\dagger}a+\frac{1}{2}\right)+\hbar\Omega(\boldsymbol{R})(ab^{\dagger}+a^{\dagger}b), \tag{8.2.3}$$

此处

$$\Omega(\boldsymbol{R})=\frac{1}{\hbar}\left(\frac{2\pi\,\hbar\omega}{\mathscr{V}}\right)^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{R})\cdot\boldsymbol{d}.$$

在选择 $|e\rangle$，$|g\rangle$ 的相位时使 $\Omega(\boldsymbol{R})$ 为实数，这个模型是 Jaynes 和 Cummings 提出的[4]. 将 H（式(8.2.3)）的前两项之和记为 H_0（原子与场 Hamilton 量之和），第三项记为 H_{int}（原子与场相互作用），则简单的计算给出在共振条件下 $\omega_0=\omega$，有

$$[H_0,H_{\text{int}}]=0. \tag{8.2.4}$$

这说明 H 的本征态可以用 H_0 的本征态 $|e,n\rangle$ 和 $|g,n+1\rangle$ 的线性叠加组成. 本征态中指标 n 代表光子数.

8.2.1 耦合原子-腔体系的本征态

先考虑共振情况 $\omega_0=\omega$. 此时 H_0 的本征态 $|e,n\rangle$ 和 $|g,n+1\rangle$ 是简并的，H 的本征态是

$$|\pm\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}[|e,n\rangle\pm|g,n+1\rangle]. \tag{8.2.5}$$

H_{int} 作用于 H_0 本征态的结果是

$$\begin{aligned} H_{\text{int}}|e,n\rangle&=\hbar\Omega\sqrt{n+1}\,|g,n+1\rangle, \\ H_{\text{int}}|g,n+1\rangle&=\hbar\Omega\sqrt{n+1}\,|e,n\rangle, \end{aligned} \tag{8.2.6}$$

从而得到 H 的本征值为

$$E_{\pm}=\hbar\omega(n+1)\pm\hbar\Omega_0, \tag{8.2.7}$$

其中

$$\Omega_0=\Omega\sqrt{n+1}, \tag{8.2.8}$$

称为真空 Rabi 频率. 这是量子力学中二能级共振. 如果腔中原子在 $t=0$ 时处于 $|e\rangle$ 态，则在时间 t 仍处于此态的几率是

$$P_e(t)=\cos^2\Omega_0 t, \tag{8.2.9}$$

这种振荡称为 Rabi 振荡.

如果有失谐，则 H_0 本征态 $|e,n\rangle$ 和 $|g,n+1\rangle$ 不再简并. 由于

$$\left.\begin{aligned} &ab^{\dagger}|e,n\rangle=0, && ab^{\dagger}|g,n+1\rangle=\sqrt{n+1}\,|e,n\rangle, \\ &a^{\dagger}b|e,n\rangle=\sqrt{n+1}\,|g,n+1\rangle, && a^{\dagger}b|g,n+1\rangle=0, \end{aligned}\right\} \tag{8.2.10}$$

可以尝试用以下线性组合满足 Schrödinger 方程：

$$\left.\begin{aligned}|+,n\rangle&=\cos\theta|e,n\rangle-\sin\theta|g,n+1\rangle,\\|-,n\rangle&=\sin\theta|e,n\rangle+\cos\theta|g,n+1,\end{aligned}\right\}\tag{8.2.11}$$

θ_n 是待定参数. 由式(8.2.10)可得

$$H\,|+,n\rangle=\left(\frac{\hbar\omega_0}{2}+\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-\hbar\Omega\,\sqrt{n+1}\tan\theta\right)\cos\theta\,|e,n\rangle$$

$$-\left(-\frac{\hbar\omega_0}{2}+\hbar\omega\left(n+\frac{3}{2}\right)-\frac{\hbar\Omega\,\sqrt{n+1}}{\tan\theta}\right)\sin\theta\,|g,n+1\rangle.$$

要求 $|+,n\rangle$ 成为 H 的本征态，相应本征值 E_+，有

$$H\,|+,n\rangle=E_+|+,n\rangle.$$

与前式比较，就可以确定 θ，它将与 n 有关：

$$\begin{aligned}E_+&=\frac{\hbar\omega_0}{2}+\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-\hbar\Omega\,\sqrt{n+1}\tan\theta\\&=-\frac{\hbar\omega_0}{2}+\hbar\omega\left(n+\frac{3}{2}\right)-\frac{\hbar\Omega\,\sqrt{n+1}}{\tan\theta}\end{aligned}$$

记失谐为 δ，$\delta=\omega-\omega_0$，上式给出

$$\delta=\Omega\,\sqrt{n+1}\left(\frac{1}{\tan\theta}-\tan\theta\right)=2\Omega\,\sqrt{n+1}\,\frac{1}{\tan2\theta},$$

即(将 θ 记为 θ_n)

$$\tan2\theta_n=\frac{2\Omega\,\sqrt{n+1}}{\delta},\quad 0\leqslant\theta_n\leqslant\frac{\pi}{2},\tag{8.2.12}$$

并有

$$E_+=(n+1)\,\hbar\omega+\frac{\hbar}{2}\,\sqrt{4\Omega^2(n+1)+\delta^2}.\tag{8.2.13}$$

类似地，有

$$\begin{aligned}&H\,|-,n\rangle=E_-|-,n\rangle,\\&E_-=(n+1)\,\hbar\omega-\frac{\hbar}{2}\,\sqrt{4\Omega^2(n+1)+\delta^2}.\end{aligned}\tag{8.2.14}$$

作为特例，$|g,0\rangle$ 是 H 的本征态，

$$E_{|g,0\rangle}=-\frac{\hbar\omega_0}{2}+\hbar\omega\left(\frac{1}{2}\right)=\frac{\hbar}{2}\delta.\tag{8.2.15}$$

腔 QED 的特点是真空电场的均方根值是位置的函数，在腔壁上它是 0，而在腔中心它是最大值. 因此原子与腔的耦合强度是原子质心位置 $\mathbf{R}$ 的函数①. 在腔外，耦合为 0，$|e,n\rangle$ 与 $|g,n+1\rangle$ 都是 H 的本征态. 若失谐 δ 是负值，则 $|e,n\rangle$ 能量大于 $|g,n+1\rangle$. 在腔内它们变为 $|+,n\rangle$ 和 $|-,n\rangle$(见式(8.2.11))，能量差别从腔壁到中心逐步增大. 图 8.1(a)画出一个圆柱形腔的剖面和在其中的一个正弦模式，场在 $z=0$ 和 $z=L$ 处为 0. 在图 8.1(b)中画出 $|\delta|\ll\Omega_0$ 时沿腔轴(z 轴)$E_\pm$ 的变化的情况. 在腔中心 E_+ 与 E_- 之差最大，达 $2\hbar\Omega_0\sqrt{n+1}$，此处 Ω_0 是在腔中心处的 Ω 值.

---

① 在自由空间原子与场相互作用 Hamilton 量式(8.1.24)中表征耦合强度 g_0^e 是不依赖坐标的. 此处将耦合强度记为 $\mathscr{G}$.

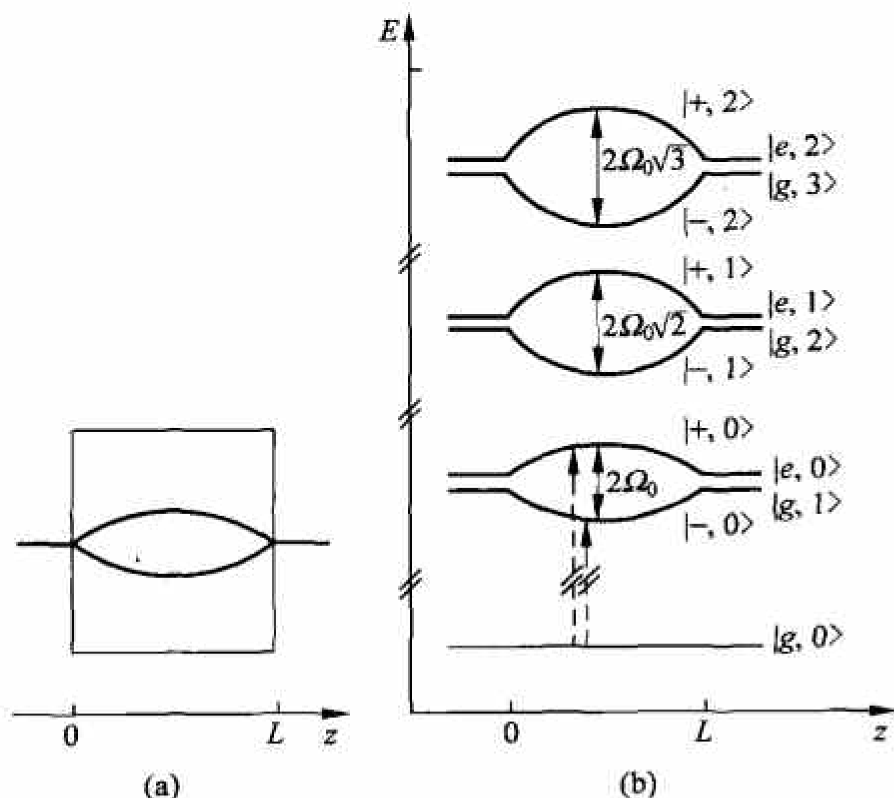


图 8.1 原子-腔体系

(a) 腔的剖面和场模式；(b) 原子-腔体系能级，$|\delta|\ll\Omega_0$

8.2.2 非共振情况下的原子能级光能移

当$|\delta|\gg\Omega_0$ 时，原子$|e\rangle$或$|g\rangle$进入腔后在腔内能量如何变化？以 $\Omega\sqrt{n+1}/|\delta|$为小量，有

$$E_{\pm,n}=(n+1)\hbar\omega\pm\frac{\hbar}{2}|\delta|\pm\hbar\frac{\Omega^2(\mathbf{R})(n+1)}{|\delta|}. \tag{8.2.16}$$

从式(8.2.11)和式(8.2.12)两式可以判断出，若 $\delta<0$，则$|+,n\rangle$与$|e,n\rangle$接近，$|-,n\rangle$与$|g,n+1\rangle$接近. 若 $\delta>0$，则相反. 因此，在$|e\rangle$进入腔$|n\rangle$后，体系的能量变化为

$$\Delta E_e(n)=-\hbar\frac{\Omega^2(\mathbf{R})}{\delta}(n+1), \tag{8.2.17}$$

对 δ 正、负都一样，这可以从式(8.2.16)分别考虑 $\delta\gtrless 0$ 情况得到. 类似地，在$|g\rangle$进入腔$|n\rangle$后，体系能量变化为

$$\Delta E_g(n)=\frac{\hbar\Omega^2(\mathbf{R})}{\delta}n, \tag{8.2.18}$$

对 δ 为正、负也是一样. 图 8.2 给出 $n=1$ 的情况，z 轴是腔的轴，0 到 L 是腔的位置. 图(a)，(b)分别给出 $\delta>0$ 和 $\delta<0$ 时的能级移动，ω_0 标出未和腔耦合时原子$|e\rangle$和$|g\rangle$态能量差除 $\hbar$. 在 $\delta>0$ 时两个能级趋近，$\delta<0$ 时两个能级远离. 和腔耦合后，$|e,n\rangle$和$|g,n\rangle$能量差的改变为(取式(8.2.17)与式(8.2.18)之差，除$\hbar$)

$$\Delta\omega_0(n)=-\frac{\hbar\Omega^2(\mathbf{R})}{\delta}(2n+1). \tag{8.2.19}$$

设场处于 Glauber 相干态，即

$$|\alpha\rangle=\mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2}\sum_n\frac{\alpha^n}{(n!)^{1/2}}|n\rangle, \tag{8.2.20}$$

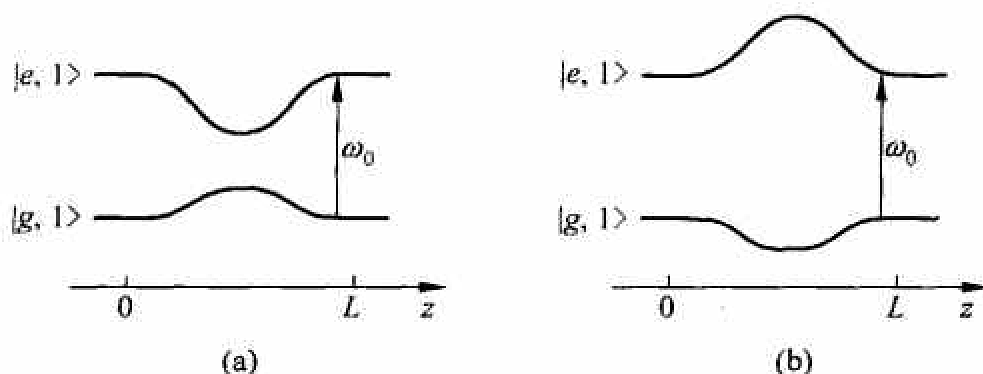


图 8.2　原子能级 $|e\rangle$ 和 $|g\rangle$ 在腔中（$n=1$）的能移

(a) $\delta>0$；(b) $\delta<0$

此处 n 是光子数. 求相干态的光子数分布，得

$$P(n) = |\langle n \mid \alpha\rangle|^2 = \frac{|\alpha|^{2n} e^{-|\alpha|^2}}{n!}, \tag{8.2.21}$$

正是 Poisson 分布，并有

$$\bar{n} = \langle \alpha \mid a^\dagger a \mid \alpha\rangle = |\alpha|^2, \tag{8.2.22}$$

Rabi 振荡出现复杂的情况. 由于 Ω 与 n 有关，因此相干态中不同 n 的成分振荡频率不同，会出现干涉. 对单一频率，式(8.2.9)给出

$$P_e(t) = \cos^2\Omega_0 t = \frac{1+\cos 2\Omega\sqrt{n+1}\,t}{2}.$$

对相干态应按 Poisson 分布给出

$$P_e(t) = \frac{1}{2}\left(1 + \sum_n \frac{e^{-\bar{n}}\,\bar{n}^n}{n!}\cos 2\Omega\sqrt{n+1}\,t\right). \tag{8.2.23}$$

近似计算给出[5]

$$P_e(t) = \frac{1}{2}\left\{1 + \cos 2\Omega(\bar{n}+1)^{1/2} t \exp\left[-\frac{\Omega^2 t^2 \bar{n}}{2(\bar{n}+1)}\right]\right\}, \tag{8.2.24}$$

即 Rabi 振荡在 Gauss 包络线下衰减，衰减时间为

$$t_c \approx \frac{1}{\Omega}, \tag{8.2.25}$$

此处设 $\bar{n} \approx \bar{n}+1$. 和用相干态组成的 Kepler 波包①类似，振荡也会部分恢复，恢复时间为

$$t_{\text{rev}} \approx \frac{2\pi}{\Omega}\bar{n}^{1/2}. \tag{8.2.26}$$

由于频率是无理数，因此是不可公度，恢复是不完全的. 这种衰减和部分恢复是相干态中各成分叠加的结果，因此，效应是纯量子力学的. 这种现象已在微脉泽中被观察到[6].

设腔中光子数分布为 $p(n)$，则激发原子进入腔中（以 $t=0$ 作为进入时间）到时间 t 仍处于激发态的几率为

$$P_e(t) = \sum_n p(n)\cos^2(\Omega\sqrt{n+1}\,t).$$

自发辐射相当于初始腔内没有光子，即 $n=0$. 对通常原子，g 很小②，观察 Rabi 振荡是困难

① 参阅第 4 章 4.3 节.

② 仍用 g 代表原子与腔场耦合，因此处不讨论耦合的坐标依赖.

的. 但对 Rydberg 态 g 可以很大，对 $n\approx40$ 可达 $10^3\sim10^6\,\mathrm{s}^{-1}$，甚至对 $n=0$ 情况都能观测到. 文献[6]在腔中输入小的热场(2.5K). 腔调到 21.6GHz 谐振条件，相当于^{85}Rb 的 $63P_{3/2}\leftrightarrows 61D_{5/2}$ 跃迁. 图 8.3 给出 $P_e(t)$，曲线是理论结果. 腔中光子数分布由 Boltzmann 因子给出：

$$p(n)=C\mathrm{e}^{-n\hbar\omega/kT},$$

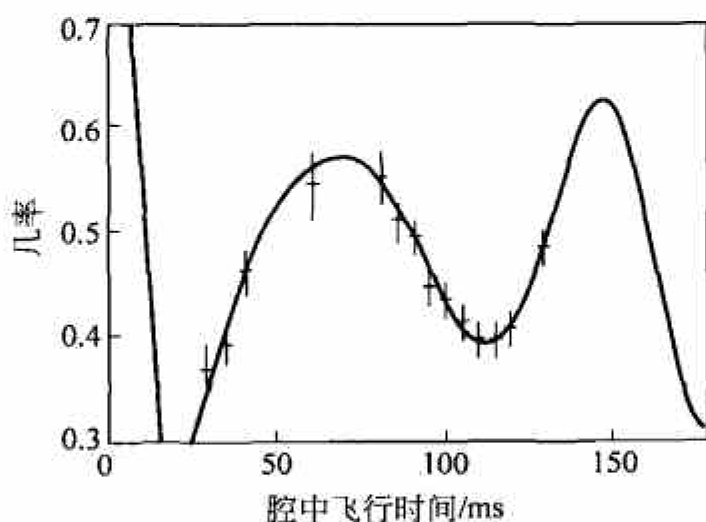


图 8.3 谐振腔中的 Rabi 振荡. 取自[6]

归一化常数 C 可以直接从求和得到：

$$1=\sum_{n=0}^{\infty}p(n)=C\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-n\hbar\omega/kT}=C\frac{1}{1-\mathrm{e}^{-\hbar\omega/kT}},$$

即

$$p(n)=(1-\mathrm{e}^{-\hbar\omega/kT})\mathrm{e}^{-n\hbar\omega/kT}.$$

在图 8.3 中 Rabi 振荡清晰可见，研究组还观察到振荡的衰减和恢复.

8.2.3 态随时间的演化

处理演化问题最方便的是用相互作用绘景，即状态的演化仅由相互作用 Hamilton 量决定. 如将 $|e,n\rangle$ 和 $|g,n+1\rangle$ 用二分量波函数表示，则可将式(8.2.6)写作

$$H_{\text{int}}\begin{bmatrix}|e,n\rangle\\|g,n+1\rangle\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0&\hbar\Omega\sqrt{n+1}\\\hbar\Omega\sqrt{n+1}&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}|e,n\rangle\\|g,n+1\rangle\end{bmatrix}\tag{8.2.27}$$

时间演化模正算符是

$$\begin{aligned}U&=\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H_{\text{int}}t\right)=\exp\left[-\mathrm{i}\begin{pmatrix}0&\Omega\sqrt{n+1}\\\Omega\sqrt{n+1}&0\end{pmatrix}t\right]\\&=\cos(\Omega\sqrt{n+1}t)-\mathrm{i}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\sin(\Omega\sqrt{n+1}t)\\&=\begin{bmatrix}\cos\Omega\sqrt{n+1}t&-\mathrm{i}\sin\Omega\sqrt{n+1}t\\-\mathrm{i}\sin\Omega\sqrt{n+1}t&\cos\Omega\sqrt{n+1}t\end{bmatrix}.\end{aligned}\tag{8.2.28}$$

若在 $t=0$ 原子进入腔时位于 $|e,n\rangle$ 态，则在时间 t 时($t<$原子穿越腔体所需时间 τ)体系状态为

$$U\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos\Omega\sqrt{n+1}t\\-\mathrm{i}\sin\Omega\sqrt{n+1}t\end{bmatrix}$$

即

$$\psi(t)=\cos\Omega\sqrt{n+1}t|e,n\rangle-\mathrm{i}\sin\Omega\sqrt{n+1}t|g,n+1\rangle. \tag{8.2.29}$$

如果 $t\geqslant\tau$，则将式(8.2.25)中的 t 换为 τ 即可. 在腔出口后对原子进行测量，则 ψ 编缩为 $|e,n\rangle$ 或 $|g,n+1\rangle$，相应几率是 $\cos^2\Omega\sqrt{n+1}\tau$ 和 $\sin^2\Omega\sqrt{n+1}\tau$.

8.3　自发辐射的抑制与加强

激发原子的自发辐射率能否因原子所处的环境而改变呢？如果把自发辐射仅看做是激发原子本身的性质，辐射率就不会因环境而改变. 但"自发"辐射是激发原子和辐射场真空涨落(或称零点能)相互作用的结果，而真空涨落是和环境有关的. 若原子位于两个镜面之间，或位于谐振腔内，真空场 $\boldsymbol{E}$ 是要满足边界条件的. 这将对辐射率产生影响. "零点能"的影响在 20 世纪 40 年代末期已由 Casimir 作过研究(Casimir Polder 力①以及 Casimir 效应②)，Casimir 效应在 1958 年被观测到. 自发辐射的抑制与加强虽在原理上早已清楚，但实验研究到 80 年代中期才获得结果. 在光学区的光子，其波长是 μm 量级的(一般是 μm 的一个分数)，能量约 1eV，频率为几倍于 10^{14} Hz. 如果要影响辐射，镜面距离就要做到 μm 量级. 如果用较宽的距离，则要选波长相应的跃迁. 这涉及圆 Rydberg 态原子的制备. 在镜面间的辐射抑制是由 Kleppner 研究组在 1985 年完成的[7]，用的间距是 0.2mm，在垂直镜面方向形成驻波，波长最大是 0.4mm，Cs 原子在进入镜面间隙以前，激发到圆 Rydberg 态，偶极矩平行于镜面，如图 8.4 所示. 原子发射波长为 0.4mm 的光子，调整镜面距离 d，当 $\lambda/2d>1$ 时辐射被抑制. 在原子离开镜面间隙时用电离探测器检测，所施电压刚够使初始的 Rydberg 态原子电离，探测到信号说明原子仍存在于初始状态. 图 8.5 表明，当 $\lambda/2d$ 到临界值时辐射突然受到抑制. 从原子通过镜面间隙所需时间计算，它已是激发原子在自由空间中的寿命的 20 倍.

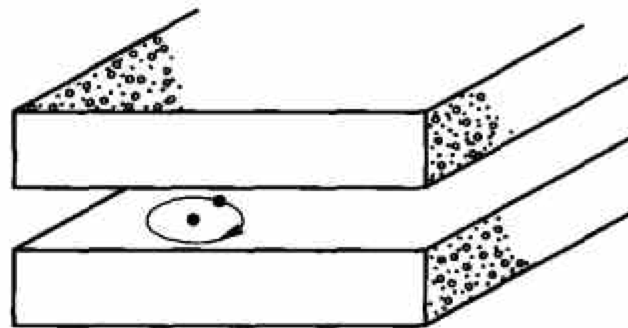


图 8.4　镜面间的激发态原子

辐射率的抑制可以通过估计一维腔单位体积的态密度来计算. Haroche 和 Raimond 给出表达式③

$$D_c=\frac{\Delta\omega_c/2}{\pi V}\frac{1}{(\Delta\omega_c/2)^2+(\omega-\omega_0)^2}. \tag{8.3.1}$$

此处 $\Delta\omega_c$ 是腔的带宽，和品质因子 Q 的关系是 $Q=\omega/\Delta\omega_c$. 对于 $d\ll\lambda$，即 $\omega\gg\omega_0$ 以及大失谐，式(8.3.1)给出 $D_c\approx1/VQ\omega$. 因此有

① 参阅本章 8.9 节.

② 参阅本章 8.11 节.

③ Advances in Atomic and Molecular Physics, Vol. 20. Academic Press, 1985.

$$\Gamma_c = \frac{D_c}{D_0}\Gamma_0 \approx \frac{\lambda^3}{VQ}\Gamma_0. \tag{8.3.2}$$

在上面我们用了式(8.1.31),得出了 $D_0=\rho_0/V=\omega^2/\pi^2c^3$.

Meschede 研究组[8] 采用 Cs 原子束,激发到 $5d$ 态. $5d\to6p$ 跃迁波长为近红外的 3.5μm. 镜面间距为 1.1μm(切断波长为 2.2μm),因此原子保持位于激发态. 原子通过镜面间隙时间为自由空间寿命的 13 倍. 研究者还用小的磁场改变原子偶极矩方向. 若磁场有平行于镜面的分量,则偶极矩会绕它进动而获得垂直分量,因而可以辐射 π 极化的光子,它传播方向平行于镜面,不再受边界的限制,因而自发辐射可以发生. 图 8.6 给出激发态存活与磁场方向的关系,角度为磁场与镜面法线间的夹角,在图 8.6 下方具体给出了磁场的方向. 从图 8.6 中可以看出,当然度从 0 增加(或从 π 减少)时,激发态存活率急剧下降.

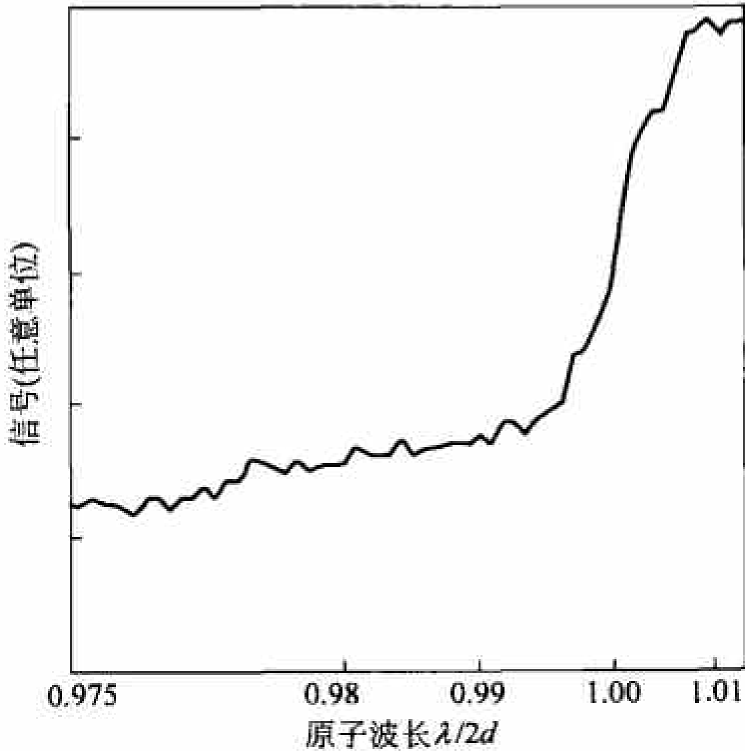


图 8.5 在镜面距离达切断值时辐射受到抑制. 取自[7]

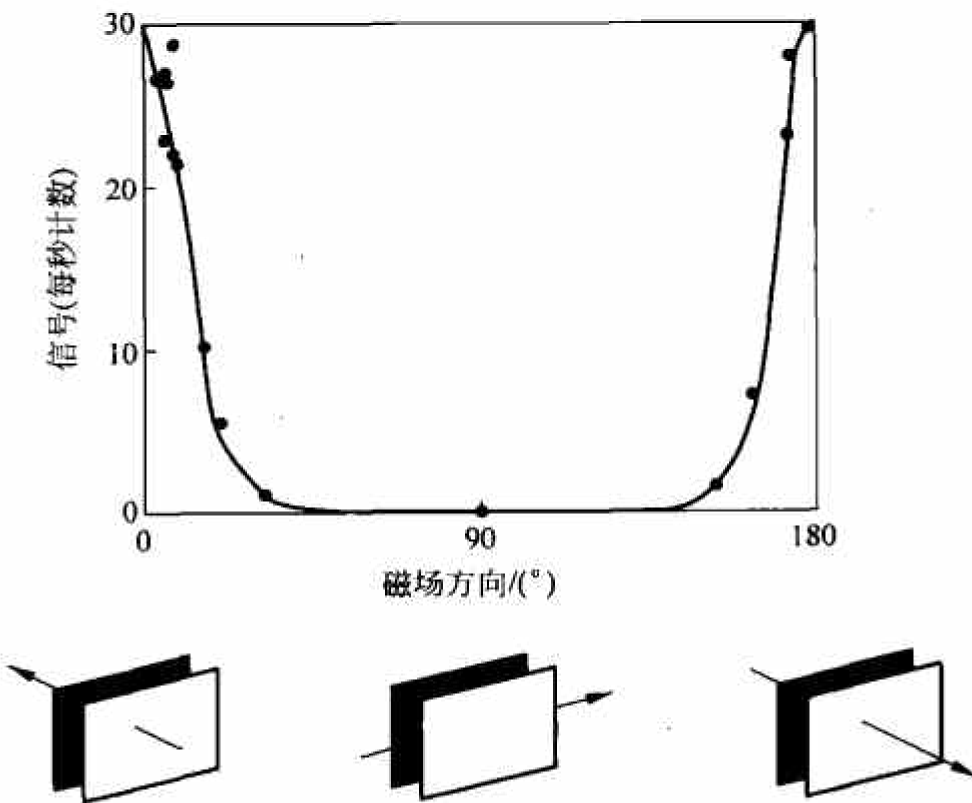


图 8.6 激发态存活与磁场方向的关系. 取自[8]

正像比切断波长还小的腔（或镜的间隙）抑制真空涨落一样，谐振腔也能增强它，从而增加辐射率．谐振腔的性能由品质因数 $Q=\frac{\omega}{\Delta\omega_c}$ 决定，$\Delta\omega_c$ 是腔的带宽．$(\Delta\omega_c)^{-1}$ 代表原子在腔中感受到的模式密度，也是光子在腔中的寿命．平行镜面的结构由于它的开放性 Q 值不能很高，在微波段用球面镜构成的腔 Q 值可以很高．超导腔的 Q 值可达 10^{11}，相应的光子存储寿命可达几分之一秒．在高 Q 腔中处于激发态的原子进行 Rabi 振荡，与在磁共振中的 Rabi 振荡有所不同的是，在磁共振中原子与外场耦合产生振荡，而在腔中是原子和它自己发出的光子耦合．自由空间中的自发辐射是不可逆的，而在腔中 Rabi 振荡则是可逆的．要想观察谐振腔对自发辐射的增强，要用低 Q 腔，辐射出的光子很快被壁吸收，不会在原子于腔中停留时间内再被它吸收．此时由于谐振，而辐射率提高．令 Γ_0 为自由空间的辐射率，Γ_c 为在谐振腔中的辐射率，λ 为光子波长，V 为腔的体积，则在共振情况 Haroche 和 Raimond 公式(8.3.1)给出

$$\Gamma_c \approx \Gamma_0 \frac{Q\lambda^3}{V}. \tag{8.3.3}$$

Haroche 的研究组[9]对 Na 原子 Rydberg 态在 mm 量级的腔中观察到增强 500 倍的自发辐射率．

8.4　微脉泽

当腔中光子寿命 $(\Delta\omega_c)^{-1}=Q/\omega$ 大于原子相继到达谐振腔的间隔时，前一个原子发出的光子就可以和下一个原子相互作用．在腔中的场积累加强的过程中，代表原子与场耦合的 $\Omega_0=\Omega\sqrt{n+1}$（式(8.2.8)）也逐渐增强，最终达到稳定状态．这个体系是一种新型的脉泽，称为微脉泽[9]．原子流很弱时（每秒 100 个原子）已能产生脉泽作用，而对这样的原子流，腔中原子最多时只有一个．因此光子在高 Q 腔内的长寿命可以使得在逐个将原子注入腔内时产生具有 n 个光子的微脉泽场．每个离开腔的原子都经过检验，看它是否处于激发态，因此腔内的光子数就可确定．设腔与原子相互作用时间为 τ，腔温度为 0K，Q 值为 ∞．探测原子处于 $|e\rangle$ 或 $|g\rangle$ 态的场电离探测器也是理想的．J. Krause，M. O. Scully 和 H. Walther[11]计算了在 m 个原子通过后腔内有 n 个光子的几率，记为 $P_n(m)$．从式(8.2.9)得知，当腔中有 n 个光子时，通过一个原子（处于 $|e\rangle$ 态）后体系位于 $|e,n\rangle$ 态的几率是

$$P_{e,n}(\tau) = \cos^2\Omega\sqrt{n+1}\,\tau \equiv c(n), \tag{8.4.1}$$

而位于 $|g,n+1\rangle$ 态的几率是

$$P_{g,n+1}(\tau) = \sin^2\Omega\sqrt{n+1}\,\tau \equiv s(n). \tag{8.4.2}$$

当有 $m-1$ 个原子通过腔后，腔内有 n 个光子和 $n-1$ 个光子的几率分别为 $P_n(m-1)$ 和 $P_{n-1}(m-1)$．当下一个（第 m 个）原子通过后，腔内有 n 个光子的几率为

$$P_n(m) = c(n)P_n(m-1) + s(n-1)P_{n-1}(m-1). \tag{8.4.3}$$

这是一个递推关系．设初始腔内没有光子，$P_0(0)=1$．通过一个原子后 $P_0(1)=c(0)$，$P_1(1)=s(0)$．通过两个原子后

$$P_0(2) = c(0)P_0(1) = [c(0)]^2,$$

$$P_1(2)=c(1)P_1(1)+s(0)P_0(1)=s(0)(c(0)+c(1)),$$
$$P_2(2)=s(1)P_1(1)=s(0)s(1),$$

等等.文献[10]给出了普遍公式(用数学归纳法)

$$P_n(m)=\prod_{i=0}^{n-1}s(i)\sum_{\substack{i_j=0\\(i_{m-1}\leqslant\cdots\leqslant i_n)}}^{n}\prod_{j=n}^{m-1}c(i_j),\tag{8.4.4}$$

此处

$$\sum_{\substack{i_j=0\\(i_{m-1}\leqslant\cdots\leqslant i_n)}}^{n}\prod_{j=n}^{m-1}c(i_j)\equiv\begin{cases}\sum\limits_{i_n=0}^{n}\sum\limits_{i_{n+1}=0}^{i_n}\cdots\sum\limits_{i_{m-1}=0}^{i_{m-2}}\prod\limits_{j=n}^{m-1}c(i_j), & m>n;\\ 1, m=n;\\ 0, & m<n \text{ 或 } n<0.\end{cases}$$

图 8.7 给出 $g\tau=\Omega\sqrt{n+1}\tau=0.4$ 时的 $P_n(m)$ 作为 n 的函数对 m 为 5～1 000 间若干值的曲线.当腔中光子数增长到一定程度 n_0 时,如果 n_0 满足 $\Omega\sqrt{n_0+1}\tau$ 为 π 的整数倍时就达到稳定状态.因为下一个原子进入腔内再离开腔后,处于原来态 $|e\rangle$ 的几率 $P_{e,n_0}(\tau)=1$ (见式(8.2.29)).这种光子数完全确定(相位完全不确定)的状态是高度非经典的,它的幅度涨落为 0,经典场的幅度涨落是$\sqrt{n}$.

Haroche 研究组还创造了一个二光子过程的微脉泽[12].在写出电子与场相互作用 Hamilton 量(式(8.1.21))时,$\frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2$ 项被弃去,原因是它导致二光子过程.在单光子过程能发生时,二光子几率要小得多,因此可以略去.考虑图 8.8(a)所示的 Rb 能级图.Rydberg 态 $40S_{1/2}$ 在自由空间当然首选跃迁到 $39P_{3/2}$ 退激,但在把谐振腔调到 $\nu=68.415\ 87\text{GHz}$ 时,这个跃迁被抑制,此时二光子跃迁到 $39S_{1/2}$ 就成为可能了(二能级的能量差正好相当于谐振频率的两倍).图 8.8(b)给出在腔中出来的位于基态 $39S_{1/2}$ 与激发态 $40S_{1/2}$ 的原子数之比,它是腔谐振频率的函数,可见在二光子共振附近二光子脉泽状态出现.

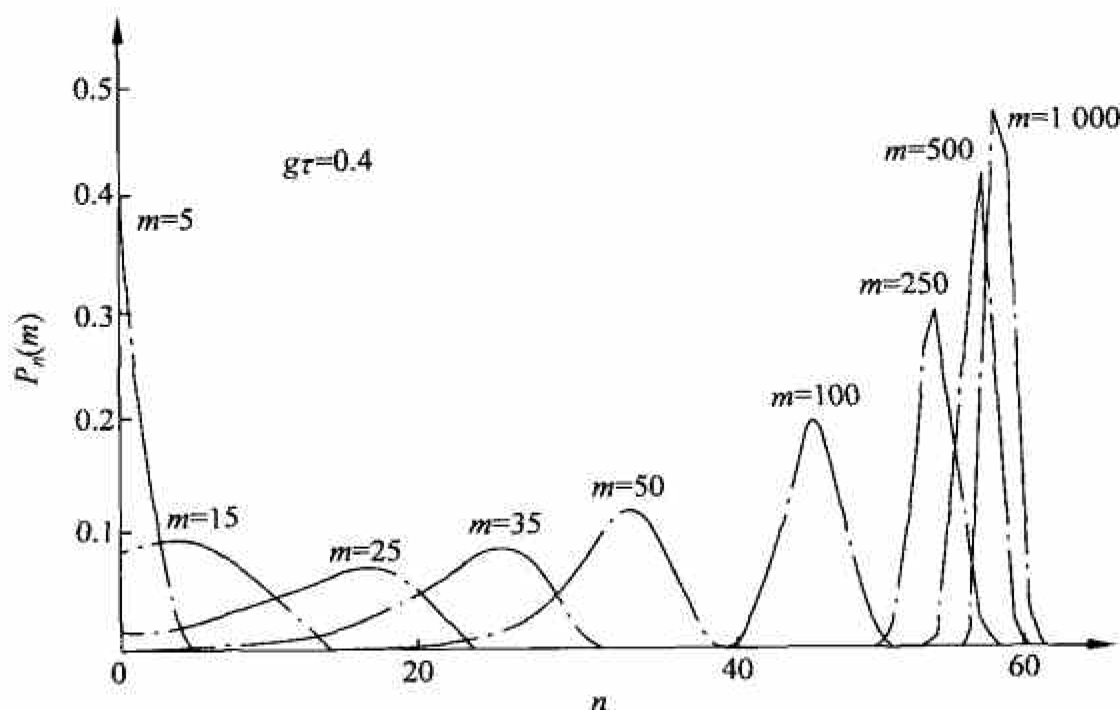


图 8.7 当 m 个原子通过时腔中光子数分布.取自[11]

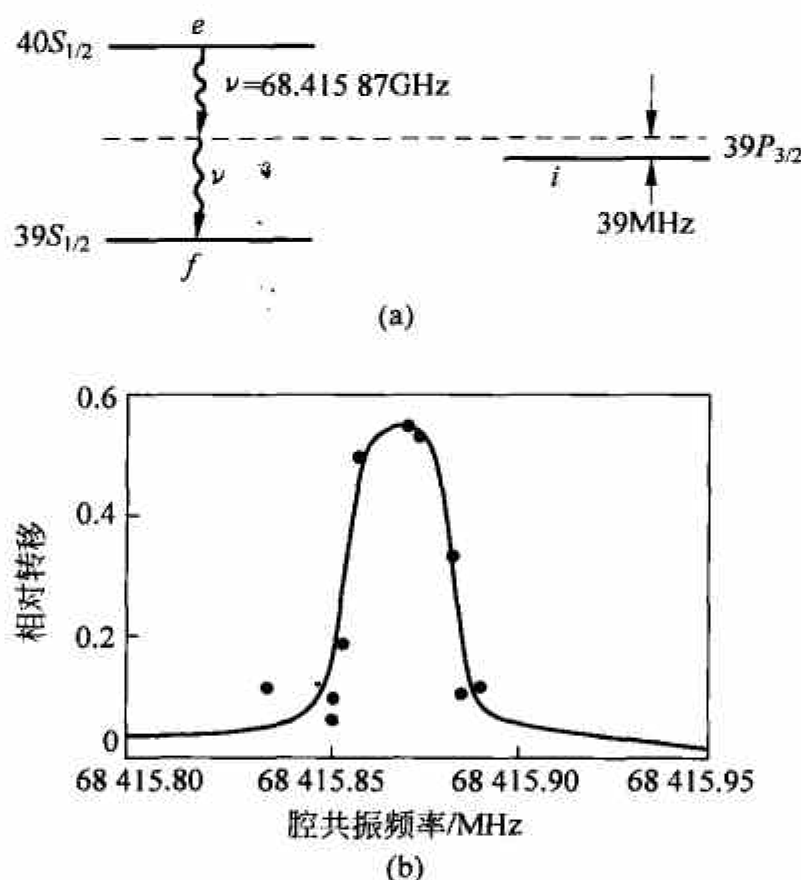


图 8.8　Rb Rydberg 能级图(a)与二光子跃迁脉泽(b). 取自[12]

8.5　逆 Stern-Gerlach 效应

在 8.2 节中讨论了原子$|e\rangle$态和$|g\rangle$态进入腔后能级发生移动，这个能量变化是指体系 Jaynes-Cummings Hamilton 量(式(8.2.3))相应的能量变化. 它包括腔场、原子内部运动和相互作用能量，但并未包括原子质心运动的能量. 如果将质心运动能量也包括在内，总和应是守恒的. 因此体系内部运动能量的变化会导致质心动能的改变，即原子进入腔后要受到力的作用. 设原子质心运动是慢的，使其内部运动能适应 $\boldsymbol{R}$ 的缓慢变化. 这时就可以用绝热近似. 在 Born-Oppenheimer 近似中，电子的内部运动能量正是原子质心运动所感受到的势能，这个势能梯度冠以负号正是腔对原子的作用力. 原子进入非谐振的有强度梯度的光场时感受到偶极力，在 1992 年已有研究报道(C. Cohen-Tannoudji)，但这里的光场可以是极少数光子的场. 根据式(8.2.17)、式(8.2.18)和图 8.2，真空对$|g\rangle$态原子没有作用力，对$|e\rangle$态原子是排斥($\delta<0$)或吸引($\delta>0$). 在 Rydberg 原子-微波腔体系，Rabi 耦合 $\mathscr{G}$ 是在 10^{-10}eV 量级，在原子速度很低(约 1m/s，相当$\lesssim$100mK 温度)时才能明显感受到腔中真空力的作用. 腔场的真空也能产生能级移动，可以考虑称为“腔 Lamb 能移”.

假定腔在原始时有一个大的正值失谐 δ_0. 当$|e\rangle$态原子以足够小的速度进入腔内时所感受的力(与 δ_0 成反比)不大. 当它接近腔中心时，改变失谐，使它变为一个小的负值. 此时“势阱”加深以致可以将原子捕获在阱中，Haroche 在 1991 年用动能为 μK 量级的原子完成了捕获.

对完全谐振情况($\delta=0,\theta_n=\pi/4$)，式(8.2.11)给出

$$\left.\begin{aligned}|+,n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|e,n\rangle-|g,n+1\rangle),\\ |-,n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|e,n\rangle+|g,n+1\rangle),\end{aligned}\right\} \tag{8.5.1}$$

$|e,n\rangle$和$|g,n+1\rangle$在原子进入腔前是简并的.考虑一个处于$|e\rangle$态的原子以很慢的速度进入n为一定数量(可以是0)的腔,体系状态和能量是

$$|e,n\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+,n\rangle+|-,n\rangle),\tag{8.5.2}$$

$$E_{\pm},n=(n+1)\hbar\omega\pm\hbar\Omega\sqrt{n+1}.\tag{8.5.3}$$

在原子行进过程中$|+,n\rangle$成分受到排斥.如果质心动能足够小(小于最大势垒高度),这部分会被反射回去,而$|-,n\rangle$部分被吸引,最终通过腔体.这样原子波函数的相关线性叠加就被分成反射和透射两个成分(Englert,1991).

原子质心的运动由 Schrödinger 方程支配,其中的势能就是原子"内部运动"的能量本征值(作为$\boldsymbol{R}$的函数).令原子质心运动波包为$\boldsymbol{\Psi}_{e,n}(\boldsymbol{r},t)$,其内部运动初始时为态$e$,腔失谐为$\delta$,含有$n$个光子,原子质心坐标以$\boldsymbol{r}$表示.方程是

$$\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\Psi}_{e,n}(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\boldsymbol{\Psi}_{e,n}(\boldsymbol{r},t)+E_{\pm,n}\boldsymbol{\Psi}_{e,n}(\boldsymbol{r},t).\tag{8.5.4}$$

设初始的波包宽度远比腔的尺度小.波包的演化会沿势能决定的经典轨道进行,同时还会有一定的展宽.若初始原子质心动能大于势垒高度,波包穿过腔的几率接近于1,也有很小部分被反射.穿过腔后的波包中心位置取决于原子在穿过腔时所感受到的势:势是和光子数有关的.原子-腔体系演化是绝热的,因而原子仍处于e态,腔光子数也没有变化.

在 Stern-Gerlach 实验中穿过场梯度的粒子,其轨道取决于它的自旋值,场梯度是分析粒子内部量子状态的工具.综上所述,场的梯度有不同的内部状态(光子数),它是被分析的量子体系,而原子轨道的不同是和光子数相关联的.它可以称作"逆 Stern-Gerlach 实验".若场处于 Glauber 相干态,即

$$|\alpha\rangle=\sum_n \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2}\frac{\alpha^n}{n!}|n\rangle\equiv\sum_n c_n|n\rangle,\tag{8.5.5}$$

平均光子数$\bar{n}=|\alpha|^2$,光子数涨落为$\Delta(n)=\sqrt{\bar{n}}$,α相位ϕ的涨落为$\Delta(\phi)=1/\Delta(n)$.将腔连接于经典微波源,在原子到达前切断电源就可以使腔中产生这样的场.原子波包相应的是

$$\boldsymbol{\Psi}_e(\boldsymbol{r},t)=\sum_n c_n\boldsymbol{\Psi}_{e,n}(\boldsymbol{r},t),\tag{8.5.6}$$

其中c_n由式(8.5.5)定义,$\boldsymbol{\Psi}_{e,n}(\boldsymbol{r},t)$是式(8.5.4)的解.相应不同$n$值的成分最终可以分离,在不同的位置上探测到原子就使波包编缩,而将场的光子数完全确定.图8.9是 Stern-Gerlach 实验示意图.

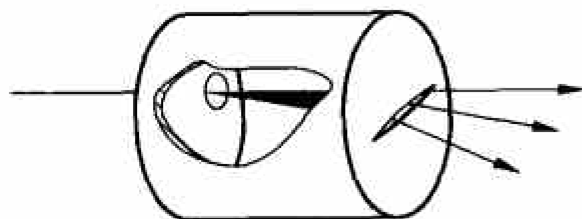


图 8.9 逆 Stern-Gerlach 实验示意图

8.6 原子-腔色散相移效应

当失谐的值足够大时,原子通过腔时和腔不交换能量,而只是发生能移.从式(8.2.17),式(8.2.18)看,非谐振能移的符号都随δ的符号改变而改变,因此是色散的.更重要的效应是,当原子从腔中通过以后,相互作用使场发生相移,这称为原子的"指标"效应①;同

① "index effect"实际指原子和场彼此都相当于一种介质,它有等效的折射系数,产生相应的相移.index 指折射系数(refractive index),见式(8.6.5)和式(8.6.7).

时原子波包也发生相移,它和场的光子数有关,即腔的场对原子波包也是"指标"介质.图8.10绘出腔(含一定数量光子)对原子波包的相移.a,b分别表示进入腔前和离开腔后的波包,b处的虚线代表如果没有腔场时波包的位置.原子初始时位于$|e\rangle$态和n个光子腔场耦合体系的本征态是$\boldsymbol{\Psi}_{e,n}(\boldsymbol{r})$.注意这里光子数和原子内部状态都不变,$\boldsymbol{\Psi}_{e,n}(\boldsymbol{r})$是$E_{\pm,n}$势所决定的原子质心运动本征函数,$e$和$n$作为指标出现,因为势和它们有关.本征方程是[①]

$$\nabla^2 \boldsymbol{\Psi}_{e,n}(\boldsymbol{r}) + \frac{2M}{\hbar^2}[E_{n,K} - E_{\pm,n}(\boldsymbol{r})]\boldsymbol{\Psi}_{e,n}(\boldsymbol{r}) = 0, \tag{8.6.1}$$

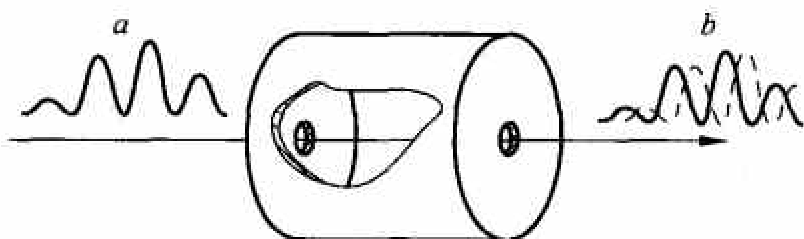


图8.10　原子波包由于腔场得到的相移

它是和含时的Schrödinger方程(8.5.4)相应的.$E_{n,K}$是能量本征值,

$$E_{n,K} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{\hbar^2 K^2}{2M}, \tag{8.6.2}$$

式(8.6.2)右方三项分别代表了场的能量,$|e\rangle$态原子能量和原子质心运动动能,其中M是原子质量,$\hbar K$是质心运动动量.原子初始位于$|e\rangle$态,进入腔后当$\delta<0$时它成为$|+,n\rangle$态,能量为(据式(8.2.16))

$$E_{+,n} = (n+1)\hbar\omega - \frac{\hbar}{2}\delta - \hbar\frac{\Omega^2(\boldsymbol{r})(n+1)}{\delta}. \tag{8.6.3}$$

由于$\delta<0$,故可将式(8.2.16)中的$+|\delta|$改为$-\delta$,当$\delta>0$时它成为$|-,n\rangle$态,根据式(8.2.16)能量是

$$E_{-,n} = (n+1)\hbar\omega - \frac{\hbar}{2}\delta - \hbar\frac{\Omega^2(\boldsymbol{r})(n+1)}{\delta}, \tag{8.6.4}$$

形式与式(8.6.3)相同.由于$\delta>0$,因此可将式(8.2.16)中的$|\delta|$直接写为δ.不论δ是正或负,式(8.6.1)中的势能都是式(8.6.3)或式(8.6.4)的右方.$E_{n,K}-E_{\pm,n}(\boldsymbol{r})$直接可以得到

$$\frac{2M}{\hbar^2}(E_{n,K} - E_{\pm,n}(\boldsymbol{r})) = K^2 + \frac{2M\Omega^2(\boldsymbol{r})(n+1)}{\hbar\delta}.$$

因此式(8.6.1)可以写为

$$\nabla^2 \boldsymbol{\Psi}_{e,n}(\boldsymbol{r}) + N_{e,K}^2 K^2 \boldsymbol{\Psi}_{e,n}(\boldsymbol{r}) = 0, \tag{8.6.5}$$

其中

$$N_{e,K} = \left[1 + \frac{2M}{\hbar K^2}\frac{\Omega^2(\boldsymbol{r})(n+1)}{\delta}\right]^{1/2} \approx 1 + \frac{M}{\hbar K^2}\frac{\Omega^2(\boldsymbol{r})(n+1)}{\delta}. \tag{8.6.6}$$

和描述光场在具有折射系数$N(\boldsymbol{r})$的透明介质中传播的Maxwell波动方程相比,形式完全一样:

---

① 本节原子与腔场体系状态用Ψ,原子状态用ψ,场的状态用Φ表示.

$$\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) + N^2(\boldsymbol{r})K^2\psi(\boldsymbol{r}) = 0. \tag{8.6.7}$$

如进入腔场的原子初始处于 g 态，折射系数是

$$N_{g,K}(\boldsymbol{r}) \approx 1 - \frac{M}{\hbar K^2}\frac{\Omega^2(\boldsymbol{r})(n+1)}{\delta}. \tag{8.6.8}$$

和光学情况对比，由折射系数 $N_j(\boldsymbol{r})$对原子波函数产生的相移是

$$\Delta\phi_j(n) = \int[N_{j,K}(\boldsymbol{r}) - 1]K\mathrm{d}z, \tag{8.6.9}$$

此处 $j=(e,g)$，积分沿原子在腔内进行. 将式(8.6.6)和式(8.6.8)代入，并令$\frac{M}{\hbar K}=\frac{1}{v}$，$v$ 为原子速度，得

$$\begin{aligned}\Delta\phi_e &= (n+1)\varepsilon,\\ \Delta\phi_g &= -n\varepsilon,\end{aligned} \tag{8.6.10}$$

此处

$$\varepsilon = \frac{1}{v\delta}\int\Omega^2(\boldsymbol{r})\mathrm{d}z. \tag{8.6.11}$$

考虑一个准单色原子波包 $\psi_{g,K,n}(\boldsymbol{r},t)$，由 $\boldsymbol{\Psi}_{g,n}$的 Schrödinger 方程的解叠加而成，它们的 K 值仅在平均值 $\overline{K}$ 附近分布，这样腔场的指标色散作用可以忽略，叠加各成分的相移基本相同，于是有

$$\psi_{g,K,n}(\boldsymbol{r},t) = \psi_{g,K,0}(\boldsymbol{r},t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\varepsilon}. \tag{8.6.12}$$

右方的 $\psi_{g,K,0}$是没有腔场时的波包. 因此在一级近似下腔场的效应是对波包赋予一个相移，而波包的形式变化不大. 在图 8.10 中 b 处的实线就相当于 $\psi_{g,K,n}$，虚线相当于 $\psi_{g,K,0}$. 和逆 Stern-Gerlach 实验相比，那里对不同的 n 波包，中心路径不同，是高阶效应. 由于对不同路径(不同 K 值)的折射系数不同(色散)，探测这个微小效应是比较困难的. 这里是一阶效应，因此探测相移是更灵敏的.

对腔场而言，原子也是指标介质. 如果起始时场处于 Glauber 相干态$|\alpha\rangle$，在原子处于$|g\rangle$态通过腔体，体系的状态是

$$|\boldsymbol{\Psi}\rangle = \sum_n c_n\psi_{g,K,0}(\boldsymbol{r},t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\varepsilon}|n\rangle. \tag{8.6.13}$$

此处系数 c_n 是在式(8.5.5)中定义的. 这个状态可以看做是未被扰动的原子波包和场的终态直积，而场的终态

$$|\Phi_g\rangle = \sum_n c_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\varepsilon}|n\rangle = |\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon}\rangle, \tag{8.6.14}$$

是相移的 Glauber 态. 若原子处于$|e\rangle$态，则有

$$|\Phi_e\rangle = \sum_n c_n\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n+1)\varepsilon}|n\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon}|\alpha\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon}\rangle. \tag{8.6.15}$$

Haroche 研究组给出腔场原子相移的测量[12]，图 8.11 是实验装置的示意图. 圆化盒 CB 制备 $n=51$ 圆 Rydberg 态的 Rb 原子. R^+ 和 R^- 是组成 Ramsey 干涉仪的两个低 Q 腔，由微波源 S_2 馈送，称为 Ramsey 区. 频率 ω_r 调节能包括原子跃迁 $51c\rightarrow50c$(c 指圆，即 $l=n-1$ 态)的谐振频率 ω_0 在内. 其他参数调到它正好是 $\pi/2$ 脉冲，即原子通过时经历$\frac{1}{4}$Rabi

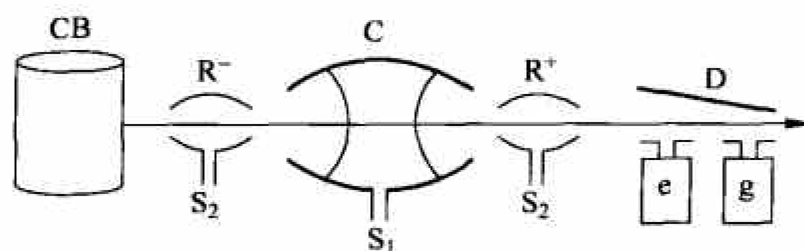


图 8.11　Ramsey 干涉仪示意图. 取自[12]

周期，这样 $|e\rangle$ 态通过 R^- 变为 $\frac{1}{\sqrt{2}}|e\rangle - \mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2}}|g\rangle$（见式(8.2.29)）. 腔 C 由微波源 S_1 馈送，频率与原子跃迁失谐. 原子通过时不能发生跃迁，而只发生相移（见式(8.6.10)）. 当原子通过 R^+ 时 $|e\rangle$ 与 $|g\rangle$ 再次混合，通过 R^-，C，R^+ 的原子由探测器 D 探测. 在低能探测器 g 收到的信号给出 $|e\rangle \to |g\rangle$ 的跃迁率. 当调节 R^+，R^- 频率 ω_r 时跃迁率显示周期变化，这是原子干涉效应. 先不考虑腔 C 的存在. 原子最初在 $|e\rangle$ 态，最终在 $|g\rangle$ 态，它通过 R^- 与 R^+ 之间时可以是处于 $|e\rangle$ 态，也可以是处于 $|g\rangle$ 态. 究竟它是在 R^- 中变为 $|g\rangle$ 态的，还是在 R^+ 中变的，这是两种不同的道路. 两种道路在探测器 g 中相合，就产生了 Ramsey 条纹. 图 8.12 给出探测信号作为 $(\omega_r - \omega_0)/2\pi$ 函数的这个"条纹"，失谐是 $\delta/2\pi = 150\text{kHz}$. 当有光子的腔在 R^- 与 R^+ 间出现时，它使原子波函数的两个叠加成分 $|e,n\rangle$ 与 $|g,n\rangle$ 各自发生不同的相移，即 $(n+1)\varepsilon$ 与 $-n\varepsilon$，相差是 $(2n+1)\varepsilon$. 这就使 Ramsey 条纹移动，正像在 Young 双缝中的一个后面放上一个"色散片"的结果一样. 图 8.13 给出了条纹的移动，下图是腔中没有光子时的 Ramsey 条纹，上图是平均有 1 个光子时的条纹，明显看出了移动. 测量 Ramsey 条纹移动也是对腔中光子数进行的测量. 由于腔和原子是色散耦合，光子数不改变，它实际上是量子非破坏性测量. Haroche 等还给出了用 Ramsey 干涉仪方法，通过对 m 个原子的测量确定腔中光子数（自 0 到 $2^m - 1$ 个光子）[12].

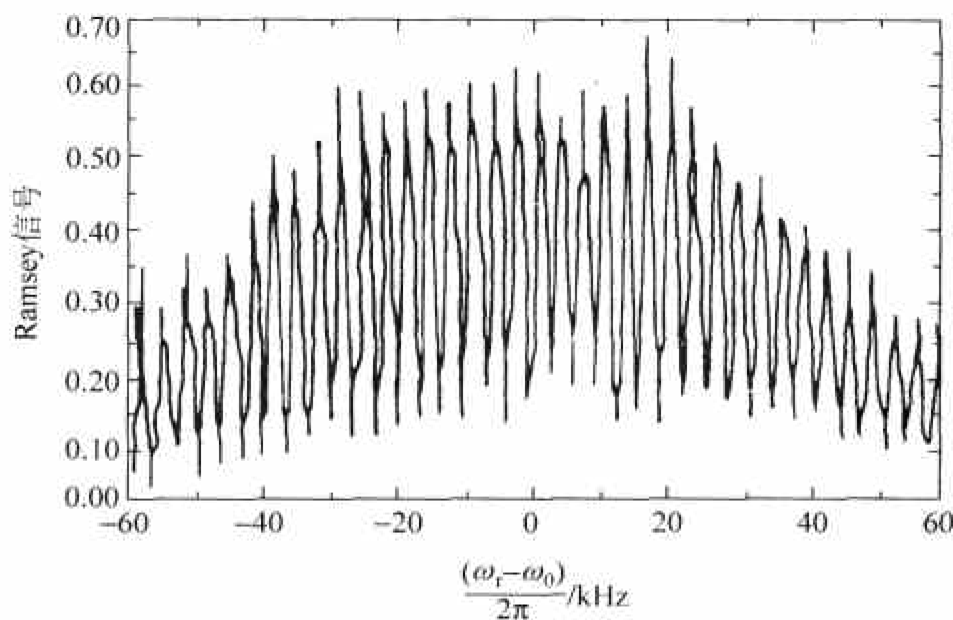


图 8.12　Rb $51c \to 50c$ 的 Ramsey 条纹. 取自[12]

以上只涉及了腔 QED 很丰富的内容的一小部分. 一些处理也是近似的，目的是使基本的物理内容得以呈现. 文献[2]概括了较多方面的综述论文.

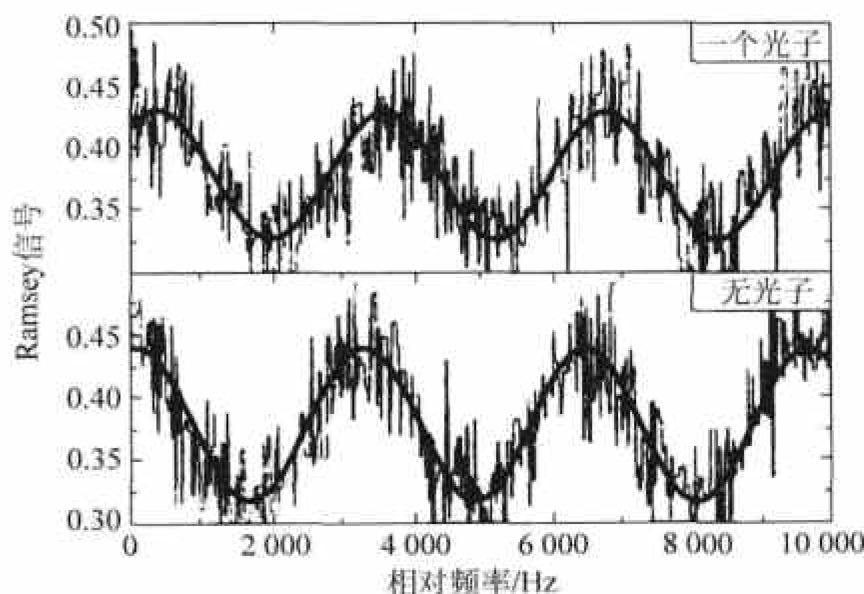


图 8.13 Ramsey 条纹由于腔中光子发生移动. 取自[12]

8.6.1 单光子的量子非破坏探测,单光子的诞生及死亡的量子非破坏探测

ENS(法国高等师范学院)研究组致力于发展实验设施,并进行了更为深刻现象的研究. 1999 年研究组在高品质腔中以量子非破坏方式探测了单个的光子,在光子存活的寿命期间(约 1ms)可以进行重复多次的探测[37]. 探测通过 Ramsey 干涉仪实现,装置示于图 8.14(a),插图表示探测原子的三个园 Rydberg 态 e,g,i. 原子一个接一个地通过腔 C,待测量的场(信号场)储于腔中. 腔与 $e\Rightarrow g$ 的跃迁频率 ν_{eg} 共振. 原子在通过 Ramsey 区 R_1 和 R_2 时有频率为 ν 的脉冲作用于其上,ν 在 $g\Rightarrow i$ 的跃迁频率 ν_{gi} 附近调谐. 下游的探测器 D 测量出射的探测原子的状态.

假设在腔 C 中有一个光子,探测原子在 $t=0$ 进入 C 时处于状态 g. 当原子穿过 C 时原子-腔体系经历了 $|g,1\rangle$ 与 $|e,0\rangle$ 间频率为 Ω 的 Rabi 振荡. 在时间为 t 时体系位于相干叠加态

$$\cos\frac{\Omega}{2}t\mid g,1\rangle+\sin\frac{\Omega}{2}t\mid e,0\rangle. \tag{8.6.16}$$

如总的相互作用时间为 $2\pi/\Omega$(原子经历了一个 2π 脉冲),原子在经历了一个吸收并再发射光子的完整循环之后回到了 g 态. 光子没有变化,原子态得到了一个相移,变为 $e^{i\pi}|g,1\rangle$. 如果腔原来是空的,体系就停留在 $|g,0\rangle$ 态上. 实际上原子要先经过 Ramsey 区 R_1,在 ν_{gi} 附近的频率为 ν 的脉冲将 $|g\rangle$ 转换为 $c_g|g\rangle+c_i|i\rangle$. 在腔中有一个光子时,原子穿过腔后体系的状态为

$$c_g e^{i\pi}\mid g,1\rangle+c_i\mid i,1\rangle. \tag{8.6.17}$$

穿过空腔后体系的状态为

$$c_g\mid g,0\rangle+c_i\mid i,0\rangle. \tag{8.6.18}$$

状态的不同由 Ramsey 区 R_2 来分析,在区中脉冲再一次将 $|g\rangle$ 和 $|i\rangle$ 混合. 如果探测原子从腔中出射时状态由式(8.6.18)给出(腔是空的),态的混合示于图 8.14(b). 经过两次混合后出射的探测原子可以位于 g 态或 i 态. 令 P_g 为探测到原子位于 g 的几率. 探测到的 g 态是原子通过腔时位于 g 和 i 两种路径的量子干涉所形成的. 当调谐频率 ν 时就形成了 Ramsey 条纹. 当腔中有一个光子时,原子出射时体系的状态是式(8.6.17). 分量 g 现在有了相移 π

如图 8.14(c)所示. Ramsey 条纹有了相应的移动.

在实验中用了 Rb 原子的园 Rydberg 态 $n=49,50,51$ 分别作为 i,g,e 态. 腔和 $e\Rightarrow g$ 的跃迁频率 51.1GHz 谐振. 光子的寿命是 1ms，对于重复的场测量是足够长的了. Ramsey 区的腔和 $g\Rightarrow i$ 的跃迁频率 54.3GHz 谐振. 装置冷却到 0.6K 或 1.2K(相应的热光子的平均数相应是 0.02 和 0.15). 制备和探测单光子的实验结果示于图 8.15. 第一个原子制备 0 或 1 个光子，第二个原子给出干涉仪条件几率的记录. $P_{g2/e1}(\nu)\nu$(图中记号为方形)和 $P_{g2/g1}(\nu)$(图中记号为菱形)分别代表第一个光子位于 e 和 g 条件下探测到第二个光子位于 g 的条件几率，相应地在腔中留下 0 或 1 个光子. 几率经过对每一个 ν 值的 250 个相关的光子计数平均重建为 ν 的函数.

对于 1 个或 0 个光子的量子非破坏测量可以用为导致基于腔量子电动力学的量子逻辑门，以及用于多原子缠绕.

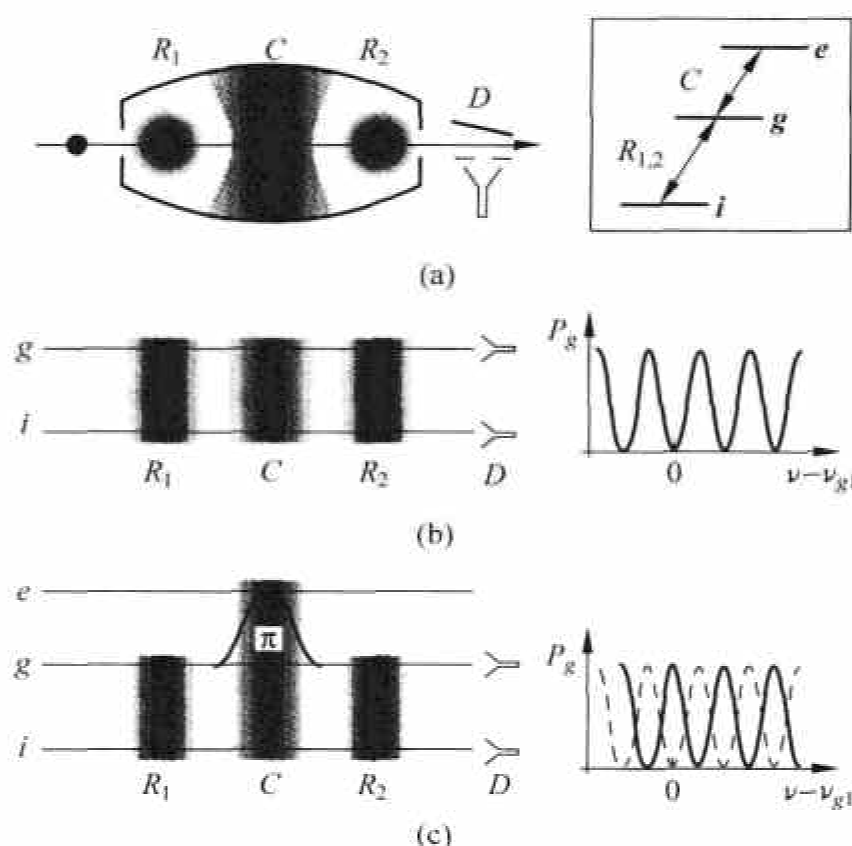


图 8.14　高品质腔和 Ramsey 区组成的干涉仪示意图，以及 Ramsey 条纹. 取自[31]

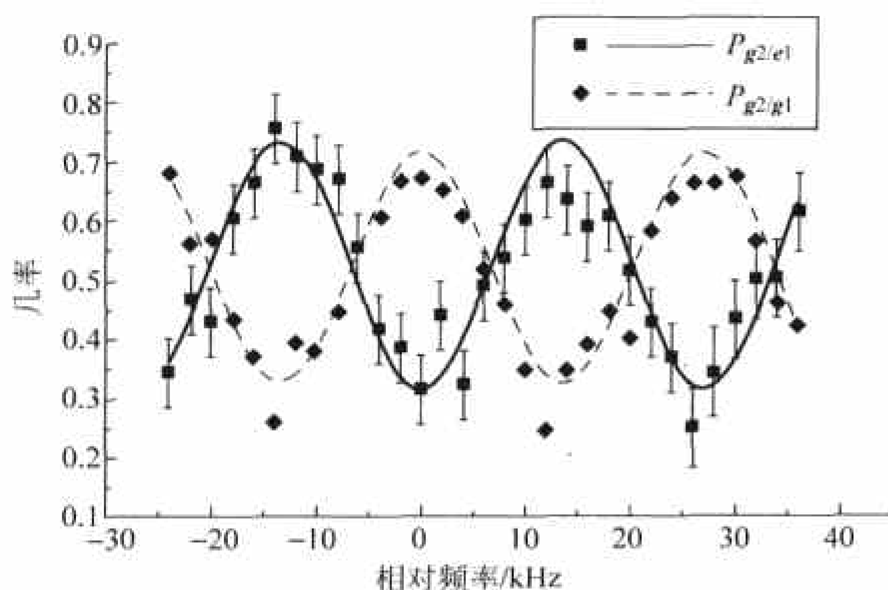


图 8.15　制备和探测单光子. 取自[38]

如果说光子寿命为1ms对于单光子的量子非破坏探测已经足够，但要记录下单光子的产生、存活以及死亡的经历要求就要高多了．这个生活经历必须用量子非破坏体制探测，因为要有多次探测的需要，并且光子在腔中的寿命要提高到几秒的量级．为了满足这个要求，ENS研究组将腔的品质因子提高了100倍，达到了5.6×10^9．探测原子仍为$n=50$的Rb园Rydberg态．实验装置示于图8.16．腔冷却到0.8K并置于屏蔽盒内，以屏蔽热和静磁场的干扰．腔对于$e\Rightarrow g$跃迁有一个失谐，它用于确定原子对于腔中光子数的响应，即色散相移．对于相移的信息，即光子数的信息，则用Ramsey干涉仪来读出．Ramsey区R_1将原子制备在$\frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle+|e\rangle)$上，它到腔的出口处演化为$\frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle+e^{i\Phi(n,\delta)}|e\rangle)$，此处$\Phi$为色散相移，$\delta$为失谐．如果失谐设定在使$\Phi(1,\delta)-\Phi(0,\delta)=\pi$的值，则Ramsey区$R_2$就理想地在$n=0$时将原子置于$g$态，而在$n=1$时将原子置于$e$态．因此如果在下游的探测器记录下$e$态，则腔中有一个光子，如果记录下$g$态，则腔是空的．腔场处于$|0\rangle$和$|1\rangle$的相干叠加态，逐个原子对场进行测量，将它投影到$|0\rangle$或$|1\rangle$上．因为测量是在量子非破坏体制下进行的，在腔场存活的时间内可以重复多次．光子产生、存活和死亡的结果示于图8.17．插图放大了探测事件的统计突然变化的区域，表现出腔场在热涨落下发生的量子跳跃．从图8.17中可以看出，有与光子数跳跃无关的探测事件，这是由于装置中的缺陷造成的．为了减小它们对于正确给出n值的影响，采取了对相继8个原子探测结果的“多数投票”办法，图8.17(a)下面的线画出结果，给出了一个寿命很长的光子的产生、存活和死亡．在图8.17(b)中给出了两个相继单光子的历史，中间相隔了场的真空态．

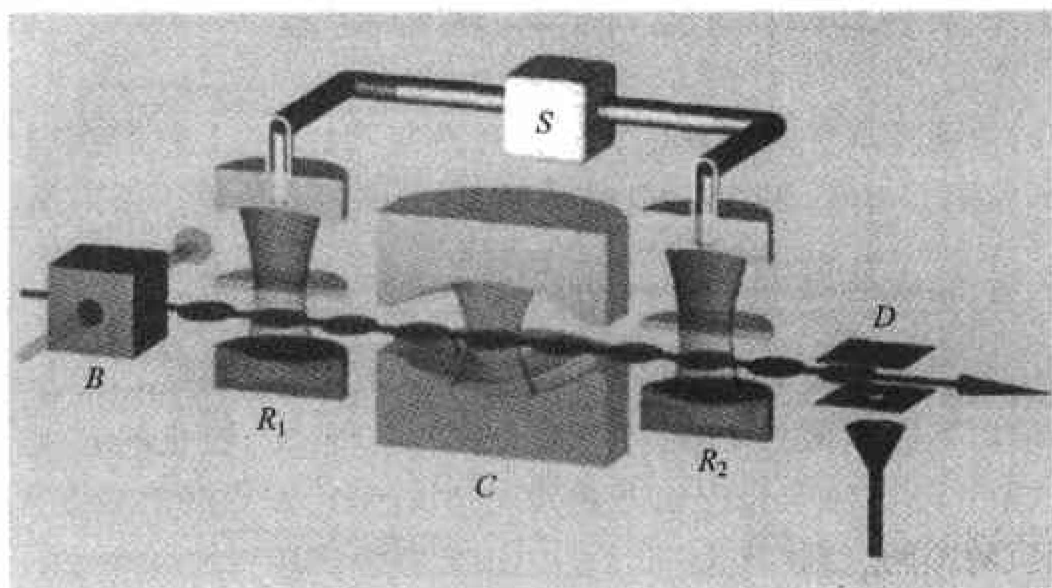


图8.16 实验装置，用Ramsey干涉仪读出光子信息

在另一个实验中，研究组监察了在每一个测量过程开始时制备的单光子Fock态的衰变．探测原子相继进入腔，给出单光子经过“多数投票”的轨道如图8.18(a)的示．对于5个、15个和904个相似轨道的平均示于图8.18(b)～(d)，显示出从量子无规性逐渐过渡为光滑的指数衰变．点曲线代表腔中光子衰变所满足的场主方程的解．

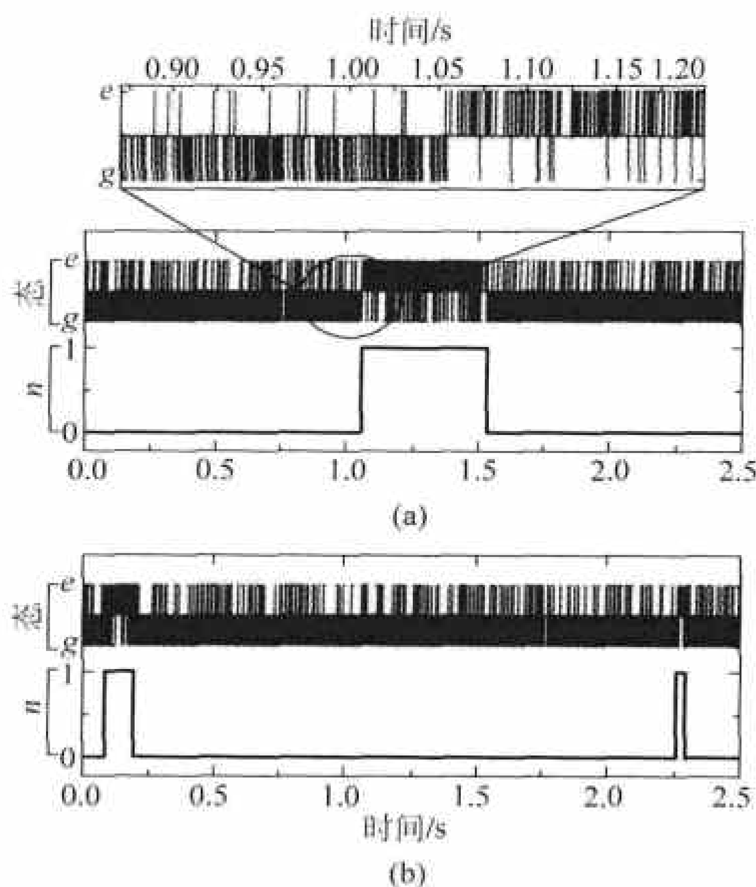


图 8.17　光子的产生、存活与死亡. 取自[38]

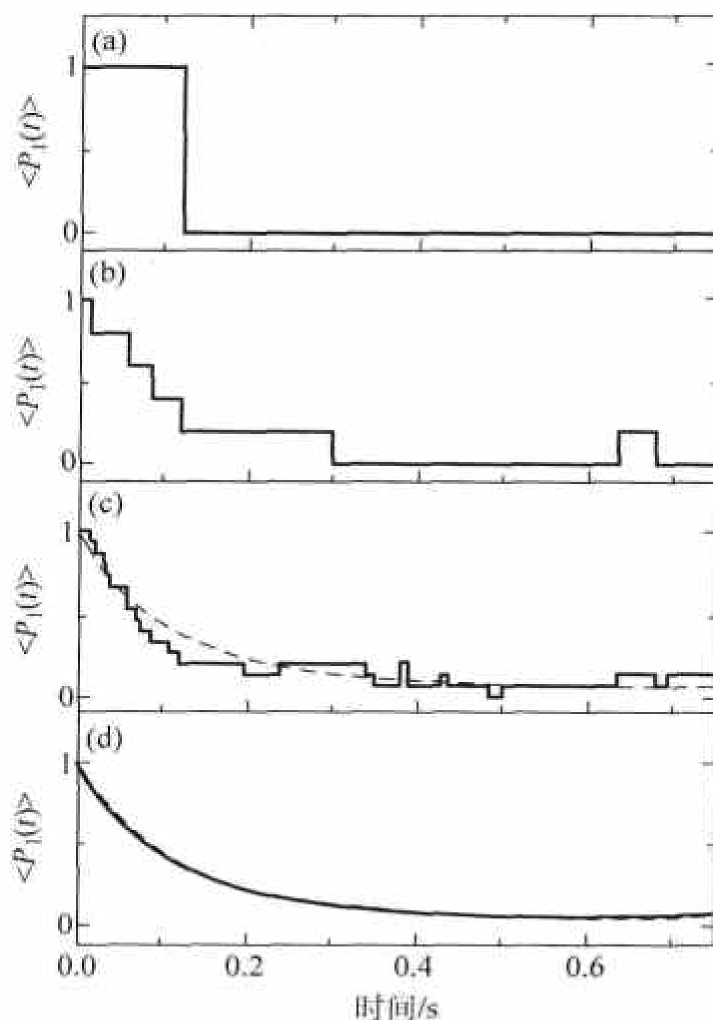


图 8.18　单光子态的衰变. 取自[38]

8.7　体系对外来扰动的响应，涨落-耗散定理

本章以后的讨论涉及线性响应理论、涨落-耗散定理. 实际上它们在理论物理许多方面也都有应用. 以下根据 Landau 和 Lifshitz[14,15]的两书中的有关论述给出简单的介绍.

8.7.1　电容率对频率的依赖，Kramers-Krönig 色散关系

在静态问题中介质的电容率 ε 和磁导率 μ 都是常数. 随时间变化的电磁场，当其频率和分子或电子振动的本征频率可相比时，将产生介质的电(或磁)极化的起伏，因此导致 ε 及 μ 随频率的变化(色散). 随时间变化的电磁场通过 Maxwell 方程必然也是随空间变化的. 对频率为 ω 的场相应的空间周期(波长)是 $\lambda=c/\omega$. 如果频率高到使 $\lambda\lesssim a$(原子尺度)，场的宏观连续描述失效. 下面讨论的是 ω 已足够大，色散已很明显，但还在场的宏观描述成立的范围，这个范围实际上是足够大的. 因为介质中极化状态的变化涉及的粒子运动速度 $v\ll c$，而极化变化的弛豫时间是 a/v，波长 $\lambda\approx ac/v\gg a$. 假定涉及的场强并不过大，$\boldsymbol{D}$ 和 $\boldsymbol{E}$ 的关系仍是线性的. 随时间变化的电场 $\boldsymbol{E}(t)$ 导致随时间变化的位移矢量 $\boldsymbol{D}(t)$. 它们之间最普遍的线性关系可以写作

$$\boldsymbol{D}(t)=\boldsymbol{E}(t)+\int_0^{\infty}f(\tau)\boldsymbol{E}(t-\tau)\mathrm{d}\tau, \tag{8.7.1}$$

此处 $f(\tau)$ 决定于介质的性质. 在式(8.7.1)中已明显表现出因果关系：任何时间的 $\boldsymbol{D}(t)$ 只和在此以前的 $\boldsymbol{E}$ 值有关，而与以后 $\boldsymbol{E}$ 的值无关. 因此积分下限设定为 0，即 $\boldsymbol{E}$ 的宗量只能$\leqslant 0$.

场可以用 Fourier 变换展为单频分量：

$$\left.\begin{aligned}\boldsymbol{E}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{E}(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\,\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi},\\ \boldsymbol{D}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{D}(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\,\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}.\end{aligned}\right\} \tag{8.7.2}$$

分量 $\boldsymbol{E}(\omega)$ 与 $\boldsymbol{D}(\omega)$ 由式(8.7.1)和式(8.7.2)联系：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{D}(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} &= \boldsymbol{E}(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + \int_0^{\infty}\mathrm{d}\tau\boldsymbol{E}(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-\tau)}f(\tau)\\ &= \boldsymbol{E}(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\left(1+\int_0^{\infty}f(\tau)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\mathrm{d}\tau\right).\end{aligned}$$

定义

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \int_0^{\infty} f(\tau)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\mathrm{d}\tau, \tag{8.7.3}$$

就有

$$\boldsymbol{D}(\omega) = \varepsilon(\omega)\boldsymbol{E}(\omega). \tag{8.7.4}$$

注意 $\boldsymbol{D}(\omega)$,$\boldsymbol{E}(\omega)$,$\varepsilon(\omega)$ 都是复量,虽然 $\boldsymbol{D}(t)$,$\boldsymbol{E}(t)$ 是实量. 从式(8.7.2)得知

$$\boldsymbol{E}(-\omega) = \boldsymbol{E}^*(\omega),\quad \boldsymbol{D}(-\omega) = \boldsymbol{D}^*(\omega) \tag{8.7.5}$$

可以保证 $\boldsymbol{E}(t)$,$\boldsymbol{D}(t)$ 为实. 将 $\varepsilon(\omega)$ 的实部与虚部分开,有

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + \mathrm{i}\varepsilon''(\omega). \tag{8.7.6}$$

从定义式(8.7.3)可得

$$\varepsilon(-\omega) = \varepsilon^*(\omega). \tag{8.7.7}$$

用实部、虚部表示,有

$$\varepsilon'(-\omega) = \varepsilon'(\omega),\quad \varepsilon''(-\omega) = -\varepsilon''(\omega), \tag{8.7.8}$$

即实部为偶函数,虚部为奇函数. 当 $\omega\to 0$ 时,$\varepsilon''(0)=0$,而 $\varepsilon'(0)=\varepsilon(0)\equiv\varepsilon_0$,为静态电容量值.

反映 $\boldsymbol{D}(t)$ 与 $\boldsymbol{E}(t)$ 因果关系的式(8.7.1)右方积分下限为 0,将导致 $\varepsilon(\omega)$ 作为复变量 ω 函数的解析性质,它以"色散关系"的形式出现. 下面的讨论是就电介质进行的,金属将会有一些具体的不同. 函数 $f(\tau)$ 对所有的 τ 值都是有限的. 考虑式(8.7.1),τ 是 $\boldsymbol{D}(t)$ 与 $\boldsymbol{E}(t-\tau)$ 宗量之差. $\boldsymbol{D}(t)$ 的值取决于 $\boldsymbol{E}(t-\tau)$ 的值,其依赖程度应随 τ 的增大而减小,即 $\boldsymbol{D}(t)$ 对在遥远的过去的 $\boldsymbol{E}$ 依赖越来越弱,故在 τ 值大于一定程度(比引起极化过程变化的弛豫时间大到一定程度)时 $f(\tau)$ 应该为 0. 将 ω 推广到复平面,将复量的实部与虚部分开,有

$$\omega = \omega' + \mathrm{i}\omega''. \tag{8.7.9}$$

式(8.7.3)中的积分包含因子 $\mathrm{e}^{-\omega''\tau}$. 对 $\omega''>0$,它在积分中是一个随 τ 增大而指数衰减的因子,因此,$\varepsilon(\omega)$ 应在复平面的上半平面($\omega''>0$)是单值而有限的. 由于上述 $f(\tau)$ 的性质,式(8.7.3)指明,$\varepsilon(\omega)$ 在实轴上也是正则(regular)的,且在 $\omega\to\infty$ 时趋近于 1[①]. 总之,$\varepsilon(\omega)$ 在上半平面与实轴上是解析的. 在这里要强调一下因果关系将 τ 限为正值的作用,否则 $\mathrm{e}^{-\omega''\tau}$ 就不成其为衰减因子. 式(8.7.3)对复变量 ω 给出

$$\varepsilon^*(\omega) = 1 + \int_0^{\infty} f(\tau)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega^*\tau}\mathrm{d}\tau = \varepsilon(-\omega^*), \tag{8.7.10}$$

---

① 由于振荡因子 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega\tau}$ 在 $\omega\to\infty$ 的行为使积分趋于 0.

这是对实变量 ω 的关系式(8.7.7)的推广. 对虚轴上的 ω 即 $\mathrm{i}\omega''$，有

$$\varepsilon(\mathrm{i}\omega'') = \varepsilon^*(\mathrm{i}\omega''), \tag{8.7.11}$$

即在正虚轴上 ε 是实量. 对负虚轴，因为 $\varepsilon(\omega)$ 并不解析会有割线出现，不能作出上述结论. 以上分析了 $\varepsilon(\omega)$ 在实轴上 $\omega\to\infty$ 时趋于 1. 由于 $\varepsilon(\omega')$ 是偶函数，在 $\omega\to-\infty$ 时也是一样. 在上半平面各方向趋向无穷时由于因子 $e^{-\omega''\tau}$ 和 $e^{\mathrm{i}\omega'\tau}$ 的作用式(8.7.3)的积分为 0. 考虑回路积分

$$\int_C \frac{\alpha(\omega)}{\omega-\omega_0}\mathrm{d}\omega, \tag{8.7.12}$$

此处 $\alpha(\omega)=\varepsilon(\omega)-1$，回路图示于图 8.19，$\omega_0$ 是在实轴上任一固定点. 被积分函数在回路 C 及它所包含的面上是解析的，因此根据 Cauchy 定理，回路积分为 0，沿无限大半圆上的积分由于 $\varepsilon(\omega)$ 很快趋于 1 也为 0. 沿小半圆上的积分，据留数定理为 $-\mathrm{i}\pi\alpha(\omega_0)$. 因此，余下的沿实轴的积分(在 ω_0 附近中断)与小半圆上积分之和为 0，即

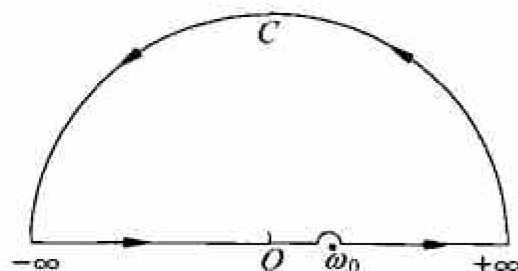


图 8.19　积分式(8.7.12)的回路

$$P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha(\omega)}{\omega-\omega_0}\mathrm{d}\omega = \mathrm{i}\pi\alpha(\omega_0).$$

P 为取积分主值. 将积分变量改写为 ξ，将 ω_0 改写为 ω，有

$$\mathrm{i}\pi\alpha(\omega) = P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha(\xi)}{\xi-\omega}\mathrm{d}\xi.$$

将 α 的实部与虚部分开，有

$$\begin{aligned}\alpha'(\omega) &= \frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha''(\xi)}{\xi-\omega}\mathrm{d}\xi,\\ \alpha''(\omega) &= -\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\alpha'(\xi)}{\xi-\omega}\mathrm{d}\xi.\end{aligned} \tag{8.7.13}$$

这是 α 的虚部与实部的关系，称为色散关系(Kramers 与 Krönig，1927 年). 将色散关系对 $\varepsilon(\omega)$ 写出，是

$$\begin{aligned}\varepsilon'(\omega)-1 &= \frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon''(\xi)}{\xi-\omega}\mathrm{d}\xi,\\ \varepsilon''(\omega) &= -\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon'(\xi)-1}{\xi-\omega}\mathrm{d}\xi.\end{aligned} \tag{8.7.14}$$

以上推导是对 $\alpha(\omega)$ 进行的. 具有在上半平面解析，且在 $\omega\to\infty$ 时趋于 0 的复变函数 $\alpha(\omega)$，其实部与虚部满足式(8.7.13). 这样的函数称为广义极化率(generalized susceptibility)，与频率有关的电极化率 $\chi(\omega)$ 和磁化率 $\chi_m(\omega)$ 都属此例.

8.7.2　涨落的关联与广义极化率

考虑一个描述处于热力学平衡体系(或它的一部分)的物理量，这个量将随时间在其平均值附近有涨落. 令 $x(t)$ 代表此物理量与其平均值之差，因而有 $\bar{x}=0$. 一般而言，在不同时间的 $x(t)$ 间有一定的关联. 这意味着在时间 t 的 x 值，对它在此后时间 t' 所取的值的几率有影响. 统计平均

$$\phi(t'-t) = \langle x(t)x(t')\rangle \tag{8.7.15}$$

是这种关联的一个度量. $\phi(t'-t)$ 只和 t 与 t' 的差有关，并在 $t'-t\to\infty$ 时趋向于 0. 根据定义

$\phi(t'-t)$对 t 与 t'互换是偶函数. 对量子力学的变量$\hat{x}(t)$，关联函数的定义是

$$\phi(t'-t)=\frac{1}{2}\langle\hat{x}(t)\,\hat{x}(t')+\hat{x}(t')\,\hat{x}(t)\rangle. \tag{8.7.16}$$

这是因为$\hat{x}(t)$一般和$\hat{x}(t')$是不对易的. 式(8.7.16)中平均是对量子力学态进行的.

关联函数的谱分析从 $x(t)$的 Fourier 变换开始：

$$x(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}x(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}t, \tag{8.7.17}$$

$$x(t)=\int_{-\infty}^{\infty}x(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}. \tag{8.7.18}$$

将式(8.7.18)代入式(8.7.16)，得

$$\phi(t'-t)=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\langle x(\omega)x(\omega')\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega t+\omega' t')}\frac{\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega'}{(2\pi)^2}. \tag{8.7.19}$$

要求式(8.7.19)右方只和 $t'-t$ 有关，$\langle x(\omega)x(\omega')\rangle$必须包含一个 δ 函数因子：

$$\langle x(\omega)x(\omega')\rangle=2\pi\,\chi^2(\omega)\delta(\omega+\omega'). \tag{8.7.20}$$

在此，χ^2 作为 ω 的函数，仅是作为 δ 函数的系数通过式(8.7.20)定义的. $x(t)$是实量，而 $x(\omega)$是复量：

$$x(-\omega)=x^*(\omega).$$

从式(8.7.20)可知，$\langle x(\omega)x(\omega')\rangle$在 $\omega'=-\omega$ 时就是$\langle x(\omega)x^*(\omega)\rangle$，因此是实量，亦即$\chi^2$ 是 ω 的实函数. 式(8.7.20)对 ω 与 ω'互换是对称的，即有

$$\chi^2(-\omega)=\chi^2(\omega). \tag{8.7.21}$$

将式(8.7.20)代入式(8.7.19)，有

$$\phi(t)=\int_{-\infty}^{\infty}\chi^2(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}, \tag{8.7.22}$$

及其逆变换

$$\chi^2(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\phi(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}t. \tag{8.7.23}$$

从式(8.7.15)知道，$\phi(0)$就是涨落变量 x 的均方值，再用式(8.7.21)和式(8.7.22)，有

$$\langle x^2\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\chi^2(\omega)\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}=\int_0^{\infty}\chi^2(\omega)\frac{\mathrm{d}\omega}{\pi}, \tag{8.7.24}$$

即$\chi^2(\omega)$是 x 均方值的谱密度. 在以上讨论中 $x(t)$是经典量. 对量子力学变量，有

$$\frac{1}{2}\langle\hat{x}(\omega)\,\hat{x}(\omega')+\hat{x}(\omega')\,\hat{x}(\omega)\rangle=2\pi\,\chi^2(\omega)\delta(\omega+\omega'). \tag{8.7.25}$$

对简单体系在一定简化假设下 $\phi(t)$和$\chi^2(\omega)$可以明显写出①，例如准定态涨落. 在一般情况下，可以将涨落(经典的或量子力学的)和描述体系在外加的作用下响应的量——称为广义极化率——联系起来. 考虑介质在外加随时间变化的电场作用下极化，将式(8.7.3)改写作

$$\varepsilon(\omega)-1=\int_0^{\infty}f(\tau)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\mathrm{d}\tau, \tag{8.7.26}$$

---

① 可参阅文献[4] § 122，该书中$\chi^2(\omega)$就直接记为 $x^2(\omega)$. 为了避免将 $x^2(\omega)$误作$[x(\omega)]^2$ 或 $x^2(t)$的 Fourier 变换，此处记为$\chi^2(\omega)$. 实际上$\chi(\omega)$并不出现.

$\varepsilon(\omega)-1$ 就是广义极化率的一例. 在体系的 Hamilton 量中，物理量 x 和外加广义力 $f(t)$ 耦合，即有

$$V = -xf(t). \tag{8.7.27}$$

在未引入 V 时，$\bar{x}=0$. 存在耦合项时 $\bar{x}(t)$ 为

$$\bar{x}(t) = \int_0^\infty \alpha(\tau)f(t-\tau)\mathrm{d}\tau, \tag{8.7.28}$$

它只和扰动力在 t 以前的值有关(因果关系)，表现在对 τ 的积分下限取为 0. $\bar{x}(t)$ 称为体系对外力扰动的响应，$\alpha(\tau)$ 是表现体系性质的时间函数，$\alpha(t)$ 的 Fourier 变换是

$$\alpha(\omega) = \int_0^\infty \alpha(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}t, \tag{8.7.29}$$

它和 $\bar{x}(\omega)$，$f(\omega)$ 的关系是

$$\bar{x}(\omega) = \alpha(\omega)f(\omega). \tag{8.7.30}$$

$\alpha(\omega)$ 称为广义极化率. $\bar{x}(t)$ 与 $f(t-\tau)$，$\bar{x}(\omega)$ 与 $f(\omega)$ 间的线性关系只在扰动 V 不太强的情况下才能成立，相应的理论称为线性响应理论. 将 $\alpha(\omega)$ 的实部与虚部分开，得

$$\alpha(\omega) = \alpha'(\omega) + \mathrm{i}\alpha''(\omega), \tag{8.7.31}$$

$$\alpha(-\omega) = \alpha^*(\omega). \tag{8.7.32}$$

式(8.7.32)保证 $\alpha(t)$ 为实. 此外，将式(8.7.32)的虚部与实部分开，得

$$\alpha'(-\omega) = \alpha'(\omega), \quad \alpha''(-\omega) = -\alpha''(\omega). \tag{8.7.33}$$

这些都和 $\varepsilon(\omega)$ 的相应关系相同.

由于和外力耦合，x 产生了关联. 外力作用于体系要做功，使体系能量变化. 对耗散体系这部分能量会转化为热，体系能量的变化率是

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} = \overline{\frac{\partial H}{\partial t}} = -\bar{x}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}. \tag{8.7.34}$$

对单频力 $f(t)$ 可以写为

$$f(t) = \frac{1}{2}(f_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + f_0^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}), \tag{8.7.35}$$

相应的 $\bar{x}$ 是

$$\bar{x}(t) = \frac{1}{2}(\alpha(\omega)f_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + \alpha(-\omega)f_0^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}), \tag{8.7.36}$$

此处用了式(8.7.30)，式(8.7.32). 将式(8.7.35)，式(8.7.36)代入式(8.7.34)并对时间取平均，得体系在外力作用下单位时间的能量耗散 Q 为

$$Q = \frac{1}{4}\mathrm{i}\omega(\alpha^* - \alpha)\mid f_0\mid^2 = \frac{1}{2}\omega\alpha''(\omega)\mid f_0^2\mid. \tag{8.7.37}$$

这个重要关系表明耗散是由 $\alpha(\omega)$ 虚部决定的. 对现实的过程，$Q>0$，因此对正实 ω 值，$\alpha(\omega)$ 的虚部为正.

8.7.3　涨落-耗散定理

外力 $f(\omega)$ 引起和它耦合的 x 的涨落 $\bar{x}(\omega)$，它们相互关系通过广义极化率 $\alpha(\omega)$ 表示. 外力也引起体系内的耗散 Q，它们间的关系和 α 的虚部 $\alpha''(\omega)$ 有关. 那么，涨落和耗散之间是否也有内在的联系呢？表达这个联系的称涨落-耗散定理. 设体系处于量子力学定态 n，计算

涨落关联函数式(8.7.25)对 n 态的平均,即

$$\frac{1}{2}(\hat{x}(\omega)\,\hat{x}(\omega')+\hat{x}(\omega')\,\hat{x}(\omega))_{nn}=\frac{1}{2}\sum_m[x(\omega)_{nm}x(\omega')_{mn}+x(\omega')_{nm}x(\omega)_{mn}]. \tag{8.7.38}$$

等号右方的求和遍及体系的所有能级. 由于 $\hat{x}(t)$ 依赖于时间,它的矩阵元应该用含时的波函数计算,即

$$(\hat{x}(t))_{nm}=\int(\psi_n e^{-i\omega_n t})^* x(\psi_m e^{-i\omega_m t})d^3x$$
$$=x_{nm}e^{i(\omega_n-\omega_m)t},$$

故有

$$x(\omega)_{nm}=\int_{-\infty}^{\infty}(\hat{x}(t))_{nm}e^{i\omega t}dt=\int_{-\infty}^{\infty}x_{nm}e^{i(\omega_n-\omega_m+\omega)t}dt$$
$$=2\pi x_{nm}\delta(\omega_{nm}+\omega),$$

此处 x_{nm} 是通常的矩阵元,

$$x_{nm}=\int\psi_n^* x\psi_m d^3x,$$

又有

$$\omega_{nm}=\omega_n-\omega_m.$$

式(8.7.38)变为

$$\frac{1}{2}(\hat{x}(\omega)\,\hat{x}(\omega')+\hat{x}(\omega')\,\hat{x}(\omega))_{nn}$$
$$=2\pi^2\sum_m|x_{nm}|^2\times[\delta(\omega_{nm}+\omega)\delta(\omega_{mn}+\omega')$$
$$+\delta(\omega_{nm}+\omega')\delta(\omega_{mn}+\omega)], \tag{8.7.39}$$

此处用了 $\hat{x}$ 的厄密性,即 $x_{nm}=x_{mn}^*$,因为 $\omega_{nm}=-\omega_{mn}$,式(8.7.39)等号右方的方括弧可以写作

$$\delta(\omega_{nm}+\omega)\delta(\omega+\omega')+\delta(\omega_{mn}+\omega)\delta(\omega+\omega'),$$

将结果和式(8.7.25)右方比较,得

$$\chi^2(\omega)=\pi\sum_m|x_{nm}|^2[\delta(\omega+\omega_{nm})+\delta(\omega+\omega_{mn})]. \tag{8.7.40}$$

右方两个 δ 函数分别对应跃迁到高于 n 和低于 n 的能级.

量子力学变量 $\hat{x}$ 的涨落是由于它耦合于外力而发生的. Hamilton 量中的耦合项是

$$\hat{V}=-f\hat{x}=-\frac{1}{2}(f_0e^{-i\omega t}+f_0^*e^{i\omega t})\hat{x}, \tag{8.7.41}$$

在它的驱动下体系发生 $n\to m$ 的跃迁,单位时间的跃迁几率是

$$w_{mn}=\frac{\pi|f_0|^2}{2\hbar^2}|x_{mn}|^2[\delta(\omega+\omega_{nm})+\delta(\omega+\omega_{mn})]. \tag{8.7.42}$$

两个 δ 函数相应体系吸收能量 $\hbar\omega_{mn}$ 和 $\hbar\omega_{nm}$. 体系的能量吸收率为

$$Q=\sum_m\hbar\omega_{mn}w_{mn}$$
$$=\frac{\pi}{2\hbar}|f_0|^2\sum_m|x_{mn}|^2[\delta(\omega+\omega_{nm})+\delta(\omega+\omega_{mn})]\omega_{mn}$$
$$=\frac{\pi}{2\hbar}|f_0|^2\omega\sum_m|x_{mn}|^2[\delta(\omega+\omega_{nm})-\delta(\omega+\omega_{mn})]. \tag{8.7.43}$$

将式(8.7.43)与式(8.7.37)比较,得

$$\alpha''(\omega) = \frac{\pi}{\hbar}\sum_m |x_{mn}|^2[\delta(\omega+\omega_{nm}) - \delta(\omega+\omega_{mn})]. \tag{8.7.44}$$

式(8.7.40)和式(8.7.44)分别反映了涨落的关联和耗散,它们右方的差别仅在于括弧内一项正负号不同. 它们之间的密切关系可以通过 Gibbs 分布求统计平均的办法找到. Gibbs 分布是

$$\rho_n = \exp\left(\frac{F-E_n}{kT}\right), \tag{8.7.45}$$

F 是自由能. 对 n 态求平均,式(8.7.40)给出

$$\langle \chi^2(\omega)\rangle = \pi\sum_{n,m}\rho_n |x_{mn}|^2[\delta(\omega+\omega_{nm}) + \delta(\omega+\omega_{mn})].$$

由于 $|x_{nm}|^2 = |x_{mn}|^2$,可以将第二项求和指标 m,n 交换,上式变为

$$\begin{aligned}
\langle \chi^2(\omega)\rangle &= \pi\sum_{n,m}(\rho_n+\rho_m)|x_{mn}|^2\delta(\omega+\omega_{nm}) \\
&= \pi\sum_{n,m}\rho_n(1+e^{\hbar\omega_{nm}/kT})|x_{mn}|^2\delta(\omega+\omega_{nm}) \\
&= \pi(1+e^{-\hbar\omega/kT})\sum_{n,m}\rho_n|x_{mn}|^2\delta(\omega+\omega_{nm}),
\end{aligned} \tag{8.7.46}$$

以上最后一步用了 δ 函数的存在. 用同样办法处理式(8.7.44),得

$$\langle \alpha''(\omega)\rangle = \frac{\pi}{\hbar}(1-e^{-\hbar\omega/kT})\sum_{n,m}\rho_n|x_{mn}|^2\delta(\omega+\omega_{nm}). \tag{8.7.47}$$

原来式(8.7.44)第二个 δ 函数前面的负号称到了 ρ_m 前,最后出现于求和号前面括弧中第二项前. 撤去统计平均符号[①],得

$$\chi^2(\omega) = \hbar\alpha''(\omega)\coth\frac{\hbar\omega}{2kT} = 2\,\hbar\alpha''(\omega)\left[\frac{1}{2}+\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1}\right]. \tag{8.7.48}$$

对第一个等号两边作 $\int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi}$ 运算,用式(8.7.24),有

$$\langle x^2\rangle = \frac{\hbar}{\pi}\int_0^\infty \alpha''(\omega)\coth\frac{\hbar\omega}{2kT}d\omega. \tag{8.7.49}$$

这就是涨落-耗散定理(Callan 和 Welton,1951 年). 式(8.7.48)右方方括弧乘以 $\hbar\omega$,第一项是振子零点能,第二项是振子在温度 T 下的平均能量. 式(8.7.48)的低温和高温极限分别是

$$\chi^2(\omega) \xrightarrow{T\to 0} \hbar\alpha''(\omega),$$

$$\chi^2(\omega) \xrightarrow{T\to\infty} \frac{2kT}{\omega}\alpha''(\omega),$$

即在低温极限涨落是量子性质的,在高温极限是经典性质的. 这个定理用途很广. 在电磁场涨落方面,下面要讨论的 van der Waals 力和 Casimir 效应都要用到它. 在量子流体方面,对 Bose 和 Fermi 流体都有应用. 如果体系有多自由度,各自耦合了不同的力,推广也是简单的. 考虑多自由度 i 的耦合项

$$\hat{V} = -\hat{x}_i f_i(t), \tag{8.7.50}$$

重复指标表示求和. 广义极化率通过下列线性关系定义:

---

① 在得到式(8.7.46)和式(8.7.47)的过程中,用到了 ρ_n 和 ρ_m(式(8.7.45))的关系. 虽然最后撤去了 Gibbs 分布的平均,但实际上 Gibbs 因子是起了作用的:因子 $e^{-\hbar\omega/kT}$ 进入了二式,并最终进入了定理(式 8.7.49)).

$$\bar{x}_i(\omega) = \alpha_{ik}(\omega) f_k(\omega). \tag{8.7.51}$$

体系的能量变化是

$$\dot{E} = -\dot{f}_i \bar{x}_i. \tag{8.7.52}$$

关联的谱密度是

$$\frac{1}{2}\langle \hat{x}_i(\omega)\,\hat{x}_k(\omega') + \hat{x}_k(\omega')\,\hat{x}_i(\omega)\rangle = 2\pi(\chi_i\chi_k)(\omega)\delta(\omega+\omega'). \tag{8.7.53}$$

这里$\chi_i\chi_k$ 作为 ω 函数的引入是和式(8.7.20)相似的①. 对量子态 n 求平均导致

$$[(\chi_i\chi_k)(\omega)]_{nn} = \pi\sum_m[(x_i)_{nm}(x_k)_{mn}\delta(\omega+\omega_{nm}) + (x_k)_{nm}(x_i)_{mn}\delta(\omega+\omega_{mn})]. \tag{8.7.54}$$

对单频扰动

$$f_i(t) = \frac{1}{2}(f_{0i}e^{-i\omega t} + f_{0i}^{*}e^{i\omega t}) \tag{8.7.55}$$

体系的响应是

$$\bar{x}_i(t) = \frac{1}{2}(\alpha_{ik}(\omega) f_{0k}e^{-i\omega t} + \alpha_{ik}^{*}(\omega) f_{0k}^{*}e^{i\omega t}). \tag{8.7.56}$$

将式(8.7.55)、式(8.7.56)代入式(8.7.52)并对扰动一周期$\frac{2\pi}{\omega}$取平均,得

$$Q = \frac{1}{4}i\omega(\alpha_{ik}^{*} - \alpha_{ki}) f_{0i} f_{0k}^{*}. \tag{8.7.57}$$

另一方面,从单位时间 $n\to m$ 跃迁几率计算体系吸收的能量,得

$$Q = \frac{\pi}{2\hbar}\omega\sum_m f_{0i} f_{0k}^{*}[(x_i)_{nm}(x_k)_{mn}\delta(\omega+\omega_{nm}) - (x_i)_{mn}(x_k)_{nm}\delta(\omega+\omega_{mn})]. \tag{8.7.58}$$

比较以上两式给出

$$\alpha_{ik}^{*} - \alpha_{ki} = -\frac{2\pi i}{\hbar}\sum_m[(x_i)_{nm}(x_k)_{mn}\delta(\omega+\omega_{nm}) - (x_i)_{mn}(x_k)_{nm}\delta(\omega+\omega_{mn})]. \tag{8.7.59}$$

对 Gibbs 分布取平均,得到广义的涨落-耗散定理:

$$(\chi_i\chi_k)(\omega) = \frac{1}{2}i\hbar(\alpha_{ki}^{*} - \alpha_{ik})\coth\frac{\hbar\omega}{kT}. \tag{8.7.60}$$

左方是 $x_i x_k$ 的谱密度.

8.8 van der Waals 相互作用

考虑两个中性原子(没有电荷,没有磁矩),距离 $R\gg a$(原子尺度). 它们间的相互作用是如何产生的呢? 原子 1 由于涨落有了自发电偶极矩,它在原子两处产生的电场极化了原子 2,产生诱导电偶极矩. 原子间的偶极-偶极相互作用是涨落关联性质. 首先给出量子力学推

---

① 为了避免$(x_i, x_k)(\omega)$是 $x_i(t)x_k(t)$的 Fourier 变换的误解,此处仍和文献[14]不同,用$(\chi_i\chi_k)(\omega)$ 它和$\langle x_i x_k\rangle$的关系是 $\phi_{ik}(0) = \langle x_i x_k\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}(\chi_i\chi_k)(\omega)\frac{d\omega}{2\pi}$

导的是 F. London(1930 年)，得到相互作用势能 V 与距离关系是 $V\propto 1/R^6$. 它属于长程力(有别于 $e^{-\kappa r}$ 型的短程力)，R^{-6} 的依赖是普适的：它与原子结构无关. 1940 年 Overbeek 用悬浮石英粉末进行 van der Waals 力的测量，结果是在距离小时，对 R^{-6} 依赖是对的. 但在 R 大时，V 的减小要比 R^{-6} 更快. Overbeek 认为这是由于推迟作用引起的. 1948 年，Casimir 和 Polder 考虑了推迟作用，得到 $V\propto R^{-7}$，结果仍是普适的. 一个依赖原子极化的过程，结果却和原子壳层结构无关，不论是否计入推迟作用都是一样. 是否存在更深刻的原因呢? Casimir 请教了 N. Bohr 并受到他的启发，从零点能的变化推导出了 Casimir-Polder 力.

两个球对称原子，分别位于 $\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2$，其距离 $R=|\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1|\gg a$(原子尺度). 由于宇称守恒，原子没有电偶极矩. 但由于涨落，原子 1 会有"自发偶极矩"$\boldsymbol{d}_1^{\rm sp}$①. 它在原子 2 处产生电场

$$\boldsymbol{E}_1(\boldsymbol{r}_2)=\frac{3\boldsymbol{n}(\boldsymbol{d}_1^{\rm sp}\cdot\boldsymbol{n})-\boldsymbol{d}_1^{\rm sp}}{R^3} \tag{8.8.1}$$

此处 $\boldsymbol{n}=\dfrac{\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1}{|\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1|}$. 这个场使原子 2 产生感应电偶极矩：

$$\boldsymbol{d}_2^{\rm ind}=\alpha_2\boldsymbol{E}_1(\boldsymbol{r}_2).$$

它在 $\boldsymbol{E}_1$ 场内的能量是

$$-\frac{1}{2}\boldsymbol{d}_2^{\rm ind}\cdot\boldsymbol{E}_1(\boldsymbol{r}_2)=-\frac{1}{2}\alpha_2\boldsymbol{E}_1^2(\boldsymbol{r}_2). \tag{8.8.2}$$

因子 $\dfrac{1}{2}$ 的出现是由于 $\boldsymbol{d}_2$ 正是被 $\boldsymbol{E}_1$ 诱导产生的. 同样原子 2 的自发(涨落)电偶极矩使原子 1 有了感应电偶极矩，带来能量 $-\dfrac{1}{2}\alpha_1\boldsymbol{E}_2^2(\boldsymbol{r}_1)$. 总相互作用能是

$$V=-\frac{1}{2}\alpha_1\boldsymbol{E}_2^2(\boldsymbol{r}_1)-\frac{1}{2}\alpha_2\boldsymbol{E}_1^2(\boldsymbol{r}_2). \tag{8.8.3}$$

涨落场需要进行平均. 从式(8.8.1)得

$$\langle\boldsymbol{E}_1^2(\boldsymbol{r}_2)\rangle=\frac{3\langle(\boldsymbol{d}_1^{\rm sp}\cdot\boldsymbol{n})^2\rangle+\langle(\boldsymbol{d}_1^{\rm sp})^2\rangle}{R^6}. \tag{8.8.4}$$

对球对称原子，其自发偶极矩应是各向同性的：

$$\langle(\boldsymbol{d}_1^{\rm sp}\cdot\boldsymbol{n})^2\rangle=\langle d_{1x}^2\rangle=\langle d_{1y}^2\rangle=\langle d_{1z}^2\rangle=\frac{1}{3}\langle d_1^2\rangle.$$

因此，

$$\langle\boldsymbol{E}_1^2(\boldsymbol{r}_2)\rangle=\frac{6}{R^6}\langle(d_{1z}^{\rm sp})^2\rangle.$$

类似地，

$$\langle\boldsymbol{E}_2^2(\boldsymbol{r}_1)\rangle=\frac{6}{R^6}\langle(d_{2z}^{\rm sp})^2\rangle.$$

相互作用能是

$$V(R)=-\frac{3}{R^6}(\alpha_2\langle(d_{1z}^{\rm sp})^2\rangle+\alpha_1\langle(d_{2z}^{\rm sp})^2\rangle). \tag{8.8.5}$$

将它表示为谱密度形式，有

① $\boldsymbol{d}^{\rm sp}$ 是涨落场所感生的，因此有 $\langle\boldsymbol{d}^{\rm sp}\rangle=0$，但出现在最终结果的都是不为 0 的平均值.

$$V(R)=-\frac{3}{R^6}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}(\alpha_2(\omega)\langle d_{1z}^2(\omega)\rangle+\alpha_1(\omega)\langle d_{2z}^2(\omega)\rangle),\tag{8.8.6}$$

在线性响应理论中,响应 $\boldsymbol{d}$ 是由涨落场诱导出来的,它们由广义极化率 α 相联系.因此根据涨落-耗散定理有

$$\left.\begin{aligned}\langle d_{1z}^2(\omega)\rangle&=\hbar\alpha''_1(\omega)\coth\frac{\hbar\omega}{2kT},\\ \langle d_{2z}^2(\omega)\rangle&=\hbar\alpha''_2(\omega)\coth\frac{\hbar\omega}{2kT},\end{aligned}\right\}\tag{8.8.7}$$

$$V(R)=-\frac{3\hbar}{R^6}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}(\alpha_2(\omega)\alpha_1''(\omega)+\alpha_1(\omega)\alpha''_2(\omega))\coth\frac{\hbar\omega}{2kT}.\tag{8.8.8}$$

α 的虚部是 ω 的奇函数,coth 也是其宗量的奇函数.因此式(8.8.8)中的 α_1 和 α_2 都是只有其实部(偶函数)对积分有贡献.式(8.8.8)括弧中的量可以改写为

$$\mathrm{Re}\alpha_2(\omega)\mathrm{Im}\alpha_1(\omega)+\mathrm{Re}\alpha_1(\omega)\mathrm{Im}\alpha_2(\omega)=\mathrm{Im}(\alpha_1(\omega)\alpha_2(\omega)),$$

即

$$V(R)=-\frac{3\hbar}{2\pi R^6}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\mathrm{Im}(\alpha_1(\omega)\alpha_2(\omega))\coth\frac{\hbar\omega}{2kT}.\tag{8.8.9}$$

对处于基态的原子,极化率是

$$\alpha(\omega)=\sum_n\frac{e^2f_{0n}}{m[(\omega_{n0}^2-\omega^2)-i\omega\delta]},\quad\delta\to0_+\tag{8.8.10}$$

此处 f_{0n} 是跃迁 $0\to n$ 的振子强度,

$$\begin{aligned}f_{0n}&=\frac{2m}{\hbar}\omega_{n0}\left|\sum_i(z_i)_{0n}\right|^2,\\ \omega_{n0}&=(E_n-E_0)/\hbar,\end{aligned}\tag{8.8.11}$$

z_i 是第 i 个电子的 z 坐标.将式(8.8.10)、式(8.8.11)代入式(8.8.9),取 $T\to0$ 并作回路积分①,最后得到

$$V(R)=-\frac{6e^4}{R^6}\sum_{n,n}\frac{\left|\sum_i(z_i^{(1)})_{0n}\right|^2\left|\sum_i(z_i^{(2)})_{0n}\right|^2}{E_n^{(1)}+E_n^{(2)}-E_0^{(1)}-E_0^{(2)}}.\tag{8.8.12}$$

R^{-6} 是普遍的,其系数 $\sum_{n,n}(\cdot)$ 是和原子壳层结构有关的,这个结果和 F. London 的相同,他采用的是对偶极-偶极相互作用

$$\frac{\boldsymbol{d}_1\cdot\boldsymbol{d}_2-3(\boldsymbol{d}_1\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{d}_2\cdot\boldsymbol{n})}{R^3}$$

作二阶微扰.虽然 $\boldsymbol{d}_1,\boldsymbol{d}_2$ 都是涨落的量,$\langle\boldsymbol{d}_1\rangle=\langle\boldsymbol{d}_2\rangle=0$,但 $\langle\boldsymbol{d}_1\cdot\boldsymbol{d}_2\rangle$,$\langle d_{1i}d_{2j}\rangle$ 都不为 0.

关于本节内容请参阅文献[16].

8.9 考虑推迟的 van der Waals 相互作用

8.9.1 振荡偶极子的场②

当 R 和振荡偶极子的辐射波长 λ 可相比时,推迟作用就不能忽略.作任意运动电荷的场是从 Lienard-Wichert 势导出的:

---

① 可参阅文献[36].

② 请参阅文献[17]§63,§72.

$$\phi = \frac{e}{R - \frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{R}}{c}},\quad \boldsymbol{A} = \frac{e\boldsymbol{v}}{c\left(R - \frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{R}}{c}\right)},\tag{8.9.1}$$

此处 $\boldsymbol{R}$ 是从电荷到观测点 P 的矢径，v 是电荷速度. 右方的量（$\boldsymbol{R}$ 与 $\boldsymbol{v}$）都在时间 t' 取值，而 t 由式(8.9.2)决定：

$$t' + \frac{R(t')}{c} = t.\tag{8.9.2}$$

$t'-t$ 是信号传播距离 R 所需时间. 有若干电荷组成的体系，当观测点 P 距体系很远时，可将原点 O 选在体系内的任一点. 令 $\boldsymbol{R}_0$ 为 P 的矢径，$\boldsymbol{r}$ 为某一电荷的矢径，在 $R_0 \gg r$ 条件下，有（见图 8.20）

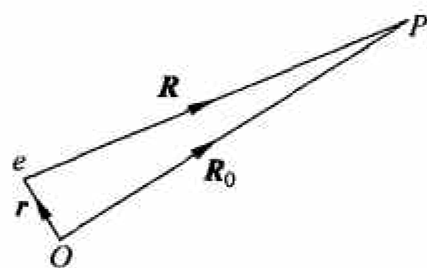


图 8.20　电荷 e 和观测点 P 的矢径关系

$$R = |\boldsymbol{R}_0 - \boldsymbol{r}| \approx R_0 - \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r},\tag{8.9.3}$$

此处

$$\boldsymbol{n} = \frac{\boldsymbol{R}_0}{R_0}.\tag{8.9.4}$$

近似地，式(8.9.3)给出偶极辐射. $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}$ 的高阶项及它们的微商则给出高阶多极辐射，其中最重要的是电四极和磁偶极辐射. 将式(8.9.3)代入式(8.9.1)的矢势，得

$$\boldsymbol{A} = \frac{e\boldsymbol{v}(t')}{cR_0\left(1 - \frac{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{v}(t')}{c}\right)}.\tag{8.9.5}$$

当电荷运动速度 $v \ll c$ 时，式(8.9.5)分母上的 $\frac{\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{v}}{c}$ 可以忽略. 由于 $v \approx \frac{a}{2\pi/\omega}$，因此 $a \approx \frac{2\pi v}{\omega} \ll \frac{2\pi c}{\omega} = \lambda$，以上的近似相当于 $a \ll \lambda$. 于是有

$$\boldsymbol{A} = \frac{e\boldsymbol{v}(t')}{cR_0} = \frac{1}{cR_0}\dot{\boldsymbol{d}}(t'),\tag{8.9.6}$$

此处 $\boldsymbol{d}$ 是电荷的偶极矩，

$$\boldsymbol{d} = e\boldsymbol{r}.\tag{8.9.7}$$

在 $v \ll c$ 近似下，式(8.9.2)变为

$$t' = t - \frac{R_0}{c}.\tag{8.9.8}$$

标量势 ϕ 和偶极矩 $\boldsymbol{d}$ 的关系可以用 Lorentz 条件得到

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A} + \frac{1}{c}\frac{\partial\phi}{\partial t} = 0.$$

将式(8.9.6)代入，对 t 积分，得

$$\phi = -\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{d}}{R_0}.\tag{8.9.9}$$

要处理的具体问题的条件是 $R \gg a$，$\lambda \gg a$，但 $R \approx \lambda$，最后一个条件带来了复杂性. 因为在 $R \gg \lambda$ 时，电荷的辐射已可以看做是平面波. 只要用 $\boldsymbol{H} = \nabla\times\boldsymbol{A}$ 求出 $\boldsymbol{H}$，就有 $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{H}\times\boldsymbol{n}$. 后面这个关系只对平面波适用. 但对 $R \approx \lambda$，辐射还不能看做是平面波. 此外在常用的 Coulomb 规范 $\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0$ 中，可以只用矢量势 $\boldsymbol{A}$ 导出 $\boldsymbol{H}$ 及 $\boldsymbol{E}$，$\boldsymbol{H} = \nabla\times\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{A}}$. 但此处的矢量势式(8.9.6)并不满足 $\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0$，因此 $\boldsymbol{A}$ 和 ϕ 都是需要的. 从 $\boldsymbol{A}$ 和 ϕ 得出 $\boldsymbol{H}$ 和 $\boldsymbol{E}$，有

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{H} &= \frac{1}{c}\nabla\times\frac{\dot{\boldsymbol{d}}}{R_0}, \\ \boldsymbol{E} &= \nabla\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{d}}{R_0}-\frac{1}{c^2}\frac{\ddot{\boldsymbol{d}}}{\boldsymbol{R}_0}. \end{aligned}\right\} \tag{8.9.10}$$

对单频分量 $\boldsymbol{d}(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$，在 t' 取值就是 $\boldsymbol{d}(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega\left(t-\frac{R_0}{c}\right)}=\boldsymbol{d}(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t+\mathrm{i}kR_0}$. 代入式(8.9.10)，得

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{H}(\omega) &= \mathrm{i}k\boldsymbol{d}(\omega)\times\nabla\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_0}}{R_0}, \\ \boldsymbol{E}(\omega) &= k^2\boldsymbol{d}(\omega)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_0}}{R_0}+(\boldsymbol{d}(\omega)\cdot\nabla)\nabla\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_0}}{R_0}. \end{aligned}\right. \tag{8.9.11}$$

进行微分，得到

$$\begin{aligned} \boldsymbol{H}(\omega) &= \mathrm{i}k\boldsymbol{d}(\omega)\times\hat{\boldsymbol{n}}\left(\frac{\mathrm{i}k}{R_0}-\frac{1}{R_0^2}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_0}, \\ \boldsymbol{E}(\omega) &= \boldsymbol{d}(\omega)\left(\frac{k^2}{R_0}+\frac{\mathrm{i}k}{R_0^2}-\frac{1}{R_0^3}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_0} \\ &\quad+\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{d}(\omega))\left(-\frac{k^2}{R_0}-\frac{3\mathrm{i}k}{R_0^2}+\frac{3}{R_0^3}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kR_0}. \end{aligned} \tag{8.9.12}$$

将式(8.9.12)用分量表示以显示 $E_i(\omega)$ 和 $d_j(\omega)$ 的关系，并将 R_0 改为 R，得

$$E_i(\omega) = \mathscr{D}_{ij}^R(\omega,\boldsymbol{R})d_j(\omega), \tag{8.9.13}$$

此处

$$\mathscr{D}_{ij}^R(\omega,\boldsymbol{R}) \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}kR}\left[\left(\frac{k^2}{R}+\frac{\mathrm{i}k}{R^2}-\frac{1}{R^3}\right)(\delta_{ij}-n_in_j)+2\left(\frac{1}{R^3}-\frac{\mathrm{i}k}{R^2}\right)n_in_j\right], \tag{8.9.14}$$

是电磁场的推迟传播函数. 和式(8.9.12)相比，式(8.9.13)便是考虑了推迟作用得到的偶极子产生的电场.

8.9.2 在均匀介质中电磁场的涨落①

电场分量的关联函数 $\langle E_i(\boldsymbol{r}_1)E_j(\boldsymbol{r}_2)\rangle$ 对获得考虑推迟的 van der Waals 力的最终结果是重要的，它和矢量势的关联 $\langle A_i(\boldsymbol{r})A_j(\boldsymbol{r}_2)\rangle$ 有关. 在 Hamilton 量中 $\boldsymbol{A}$ 是和电流密度 $\boldsymbol{j}$ 耦合的. 在均匀介质(或真空)中，扰动的 $j_k(t)$ 和响应 A_i(涨落)是通过广义极化率 α_{ik} 联系的. α_{ik} 是什么，可以通过 Maxwell 方程找出. 选 Coulomb 规范 $\phi=0$，电场导自矢量势，$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})=-\frac{1}{c}\dot{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{r})$，因此

$$\langle E_i(\boldsymbol{r}_1)E_j(\boldsymbol{r}_2)\rangle(\omega) = -\frac{\omega^2}{c^2}\langle A_i(\boldsymbol{r}_1)A_j(\boldsymbol{r}_2)\rangle(\omega). \tag{8.9.15}$$

$\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{j}$ 的关系来自 Maxwell 方程(频率表示)：

$$\nabla\times\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},\omega) = \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},\omega)-\frac{\mathrm{i}\omega}{c}\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},\omega). \tag{8.9.16}$$

右方第二项是位移电流，在介质中有

$$\left.\begin{aligned} D_i(\omega) &= \varepsilon_{ik}(\omega)E_k(\omega), \\ B_i(\omega) &= \mu_{ik}(\omega)H_k(\omega). \end{aligned}\right\} \tag{8.9.17}$$

① 请参阅文献[18]§75～76.

在均匀、各向同性非磁介质中 $\varepsilon_{ik}(\omega)=\varepsilon(\omega)\delta_{ik}$，$\mu_{ik}(\omega)=\delta_{ik}$. 场和矢量势的关系是

$$\left.\begin{aligned}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},\omega) &= \nabla\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega),\\ \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\omega) &= \frac{\mathrm{i}\omega}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},\omega).\end{aligned}\right\}\tag{8.9.18}$$

将以上两式连同 ε_{ik}，μ_{ik} 的条件代入式(8.9.16)，得到

$$\left[(\partial_i\partial_k-\delta_{ik}\nabla^2)-\frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon(\omega)\delta_{ik}\right]A_k(\boldsymbol{r},\omega)=\frac{4\pi}{c}j_i(\boldsymbol{r},\omega).\tag{8.9.19}$$

要解这个方程，最方便的是用 Green 函数方法. Green 函数满足的方程是

$$\left[(\partial_i\partial_j-\delta_{ij}\nabla^2)-\frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon(\omega)\delta_{ij}\right]D^{\mathrm{R}}_{jl}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2,\omega)=-4\pi\hbar\delta_{il}\delta^3(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2),\tag{8.9.20}$$

D 右上角的 R 是“推迟”之意. Maxwell 方程的内涵已经包括了传播(推迟). 将 Green 函数对 $\boldsymbol{r}$ 作 Fourier 变换，

$$D^{\mathrm{R}}_{jl}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2,\omega)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)}D^{\mathrm{R}}_{jl}(\omega,\boldsymbol{k})\mathrm{d}^3k,\tag{8.9.21}$$

则变换满足的方程是

$$\left[k_ik_j-\delta_{ij}k^2+\delta_{ij}\frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon(\omega)\right]D^{\mathrm{R}}_{jl}(\omega,\boldsymbol{k})=4\pi\hbar\delta_{il}.\tag{8.9.22}$$

方程的解是

$$D^{\mathrm{R}}_{jl}(\omega,\boldsymbol{k})=4\pi\hbar\frac{1}{\dfrac{\omega^2}{c^2}\varepsilon(\omega)-k^2}\left[\delta_{jl}-\frac{c^2}{\varepsilon(\omega)}\frac{k_jk_l}{\omega^2}\right].\tag{8.9.23}$$

这是立即可以验证的. 它是在均匀、各向同性非磁介质中的推迟 Green 函数. 方程(8.9.19)的解是

$$A_i(\boldsymbol{r},\omega)=-\frac{1}{\hbar c}\int D^{\mathrm{R}}_{ik}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2,\omega)j_k(\omega,\boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}^3r_2.\tag{8.9.24}$$

$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{j}$ 在 Hamilton 量中的耦合是

$$-\frac{1}{c}\int \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r.\tag{8.9.25}$$

从式(8.9.24)和式(8.9.25)两式可以读出，响应 A_i/c 和扰动 j_k 通过广义极化率 α_{ik} 联系，而 α_{ik} 就是

$$\alpha_{ik}(\omega,\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)=-\frac{1}{\hbar c^2}D^{\mathrm{R}}_{ik}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2,\omega).\tag{8.9.26}$$

根据涨落-耗散定理，$\boldsymbol{A}$ 的关联函数是

$$\langle A_i(\boldsymbol{r}_1)A_j(\boldsymbol{r}_2)\rangle(\omega)=-\mathrm{Im}D^{\mathrm{R}}_{ik}(\omega,\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)\coth\frac{\hbar\omega}{2kT}.\tag{8.9.27}$$

推迟 Green 函数 $D^{\mathrm{R}}_{ik}(\omega,\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$ 可以从式(8.9.23)作 Fourier 变换得到. 从

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3k\,\frac{4\pi\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}}{k^2+\chi^2}=\frac{\mathrm{e}^{-\chi R}}{R}$$

开始，作置换 $\chi=\frac{\omega}{c}\sqrt{-\varepsilon(\omega)}$，就得到

$$D^{\mathrm{R}}_{ik}(\omega,\boldsymbol{R})=-\hbar\left(\delta_{ik}+\frac{c^2}{\varepsilon(\omega)\omega^2}\partial_i\partial_k\right)\frac{\mathrm{e}^{(-\omega/c)\sqrt{-\varepsilon(\omega)}R}}{R}.$$

将上式代入式(8.9.27)及式(8.9.15)，得

$$\langle E_i(\boldsymbol{r}_1)E_j(\boldsymbol{r}_2)\rangle(\omega) = -\hbar\coth\frac{\hbar\omega}{2kT}\mathrm{Im}\left\{\frac{1}{\epsilon(\omega)}\left[\frac{\omega^2}{c^2}\delta_{ij}\epsilon(\omega)+\partial_i\partial_j\right]\times\frac{\mathrm{e}^{(-\omega/c)\sqrt{-\epsilon(\omega)}|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}.\right\} \quad (8.9.28)$$

在真空中 $\epsilon(\omega)=1$，$\sqrt{-\epsilon(\omega)}=-\mathrm{i}$[1]，故有

$$D_{ik}^{\mathrm{R}}(\omega,\boldsymbol{R}) = -\hbar\left(\delta_{ik}+\frac{c^2}{\omega^2}\partial_i\partial_k\right)\frac{\exp\left(\mathrm{i}\frac{\omega}{c}R\right)}{R}.$$

完成上式中的偏微商，得

$$D_{ik}^{\mathrm{R}}(\omega,\boldsymbol{R}) = -\hbar\frac{c^2}{\omega^2}\exp\left(\mathrm{i}\frac{\omega}{c}R\right)\left[\left(\frac{\omega^2}{c^2R}+\frac{\mathrm{i}\omega}{cR^2}-\frac{1}{R^3}\right)(\delta_{ik}-n_in_k)+2\left(\frac{1}{R^3}-\frac{\mathrm{i}\omega}{cR^2}\right)n_in_k\right]. \quad (8.9.29)$$

比较式(8.9.29)和式(8.9.14)，得知

$$\mathscr{D}_{ij}^{\mathrm{R}}(\omega,\boldsymbol{R}) = -\frac{\omega^2}{\hbar c^2}D_{ij}^{\mathrm{R}}(\omega,\boldsymbol{R}). \quad (8.9.30)$$

$\langle E_i(\boldsymbol{r}_1)E_j(\boldsymbol{r}_2)\rangle$ 也可以写作

$$\langle E_i(\boldsymbol{r}_1)E_j(\boldsymbol{r}_2)\rangle(\omega) = -\hbar\mathrm{Im}\mathscr{D}_{ij}^{\mathrm{R}}(\omega,\boldsymbol{R})\coth\frac{\hbar\omega}{2kT}. \quad (8.9.31)$$

8.9.3 Casimir-Polder 相互作用

当电磁场的传播在理论中得到反映，涨落的自发偶极子相互作用的机制就变得丰富多了．不仅有偶极子的涨落关联，还有场的涨落关联．考虑在 $\boldsymbol{r}_1$ 处的偶极矩 i 分量：

$$d_{1i}(\omega) = d_{1i}^{\mathrm{sp}}+\alpha_1(\omega)E_i(\boldsymbol{r}_1,\omega)+\alpha_1(\omega)\mathscr{D}_{ij}^{\mathrm{R}}(\omega,\boldsymbol{R})d_{2j}^{\mathrm{sp}}+\alpha_1(\omega)\mathscr{D}_{ij}^{\mathrm{R}}(\omega,\boldsymbol{R})\alpha_2(\omega)E_j(\boldsymbol{r},\omega)+\cdots. \quad (8.9.32)$$

右方第一项是自发涨落偶极矩；第二项是由涨落的场所诱导的偶极矩；第三项是由 $\boldsymbol{r}_2$ 处传播到 $\boldsymbol{r}_1$（有推迟）的电场所诱导的偶极矩；第四项是在 $\boldsymbol{r}_2$ 处的涨落场诱导产生的偶极矩产生的电场，经推迟传播到 $\boldsymbol{r}_1$ 处诱导产生的偶极矩，等等．在 $\boldsymbol{r}_1$ 处的电场是

$$\mathscr{E}_i(\boldsymbol{r}_1,\omega) = E_i(\boldsymbol{r}_1,\omega)+\mathscr{D}_{ij}^{\mathrm{R}}(\omega,\boldsymbol{R})d_{2j}^{\mathrm{sp}}+\mathscr{D}_{ij}^{\mathrm{R}}(\omega,\boldsymbol{R})\alpha_2(\omega)E_j(\boldsymbol{r}_2,\omega)+\mathscr{D}_{ij}^{\mathrm{R}}(\omega,\boldsymbol{R})\alpha_2(\omega)\mathscr{D}_{jk}^{\mathrm{R}}(\omega,-\boldsymbol{R})d_{1k}^{\mathrm{sp}}+\cdots. \quad (8.9.33)$$

右方第一项是 $\boldsymbol{r}_1$ 处的涨落场；第二项是 $\boldsymbol{r}_2$ 处的涨落自发偶极矩产生的经推迟传播到 $\boldsymbol{r}_1$ 的电场；第三项是 $\boldsymbol{r}_2$ 处的涨落场诱导产生的偶极矩所产生的电场经推迟传播到 $\boldsymbol{r}_1$ 的场；第四项是在 $\boldsymbol{r}_1$ 处的自发偶极矩产生的电场经推迟传播到 $\boldsymbol{r}_2$（注意 $\mathscr{D}_{jk}$ 的宗量 $-\boldsymbol{R}$）时诱导产生偶极矩，偶极矩的电场再经推迟传播到 $\boldsymbol{r}_1$ 的结果，等等．在 $\boldsymbol{r}_1$ 处偶极矩与电场的相互作用是

$$V(R) = -\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\langle\boldsymbol{d}_1\cdot\mathscr{E}(\boldsymbol{r}_1)\rangle(\omega), \quad (8.9.34)$$

此处标量积要对涨落取平均．考虑到以下几点：①$\langle d_{1i}^{\mathrm{sp}}\rangle=\langle d_{2j}^{\mathrm{sp}}\rangle=0$；②和 R 无关的项（例如只含 $\boldsymbol{r}_1$ 或只含 $\boldsymbol{r}_2$ 的项）可以弃去；③因与果交叉相乘所得的高阶项可以略去．最终结果[2]的

---

① i 前的负号源于对介质有 $\mathrm{Im}\epsilon>0$ 以对应吸收，请参阅文献[18]pp. 321～322.

② 请参阅文献[36].

相互作用能量，既包含电场的涨落关联函数，又包含偶极矩的涨落关联函数：

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{d}_1\cdot\mathscr{E}(\boldsymbol{r}_1,\omega)\rangle &= \alpha_1(\omega)\alpha_2(\omega)\mathscr{D}_{ij}^{R}(\omega,\boldsymbol{R})\langle E_i(\boldsymbol{r}_1)E_j(\boldsymbol{r}_2)\rangle(\omega)\\ &\quad+\alpha_1(\omega)\mathscr{D}_{ij}^{R}(\omega,\boldsymbol{R})\mathscr{D}_{ik}^{R}(\omega,\boldsymbol{R})\langle d_{2j}^{sp}d_{2k}^{sp}\rangle(\omega)\\ &\quad+\alpha_1(\omega)\alpha_2(\omega)\mathscr{D}_{ij}^{R}(\omega,\boldsymbol{R})\langle E_i(\boldsymbol{r}_1)E_j(\boldsymbol{r}_2)\rangle(\omega)\\ &\quad+\alpha_2(\omega)\mathscr{D}_{ij}^{R}(\omega,\boldsymbol{R})\mathscr{D}_{jk}^{R}(\omega,-\boldsymbol{R})\langle d_{1i}^{sp}d_{1k}^{sp}\rangle(\omega).\end{aligned} \tag{8.9.35}$$

将 d^{sp} 看做涨落变量，相应的极化率是 α_{ij}. 在各向同性介质中 $\alpha_{ij}(\omega)=\alpha(\omega)\delta_{ij}$. 因此涨落-耗散定理给出

$$\langle d_{2j}^{sp}d_{2k}^{sp}\rangle(\omega)=\hbar\mathrm{Im}\alpha_2(\omega)\coth\frac{\hbar\omega}{2kT}. \tag{8.9.36}$$

$\langle E_i(\boldsymbol{r}_1)E_j(\boldsymbol{r}_2)\rangle$ 已由式(8.9.31)给出，代入式(8.9.35)得到

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{d}_1\cdot\mathscr{E}(\boldsymbol{r}_1)\rangle(\omega) &= \hbar\coth\frac{\hbar\omega}{2kT}\big[2\alpha_1(\omega)\alpha_2(\omega)\mathscr{D}_{ij}^{R}(\omega,\boldsymbol{R})\mathrm{Im}\mathscr{D}_{ij}^{R}(\omega,\boldsymbol{R})\\ &\quad+(\alpha_1(\omega)\mathrm{Im}\alpha_2(\omega)+\alpha_2(\omega)\mathrm{Im}\alpha_1(\omega))\mathscr{D}_{ij}^{R}(\omega,\boldsymbol{R})\mathscr{D}_{ij}^{R}(\omega,\boldsymbol{R})\big].\end{aligned}$$

再经过一些变换①，最后得到相互作用能

$$V(R)=-\hbar\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\coth\frac{\hbar\omega}{2kT}(\alpha_1(\omega)\alpha_2(\omega)\mathscr{D}_{ij}^{R}(\omega,\boldsymbol{R})\mathscr{D}_{ij}^{R}(\omega,\boldsymbol{R})). \tag{8.9.37}$$

这是 $V(R)$ 的最普遍的表达式，重复指标意为求和. 给出 $\alpha(\omega)$，在原则上可以得到 $V(R)$. 下面只就两种极限情况进行讨论.

(1) 取静态极限

$$E_i(\boldsymbol{r})=-\frac{3n_in_j-\delta_{ij}}{R^3}d_{0j}$$

时，式(8.9.37)给出静态结果. 和 $E_i(\boldsymbol{r})=\mathscr{D}_{ij}^{R}(0,\boldsymbol{R})d_{0j}$ 相比，有

$$\mathscr{D}_{ij}^{R}(0,\boldsymbol{R})=\frac{3n_in_j-\delta_{ij}}{R^3}.$$

由此可得

$$\mathscr{D}_{ij}^{R}(0,\boldsymbol{R})\mathscr{D}_{ij}^{R}(0,\boldsymbol{R})=\frac{6}{R^6},$$

而式(8.9.37)给出

$$V(R)=-\frac{3\hbar}{\pi R^6}\int_0^{\infty}\mathrm{d}\omega\coth\frac{\hbar\omega}{2kT}\mathrm{Im}(\alpha_1(\omega)\alpha_2(\omega)),$$

与式(8.8.9)相同.

(2) 低温极限

对 $kT\to 0$，$\coth\frac{\hbar\omega}{2kT}\to 1$（对 $\omega>0$），将 $\mathscr{D}_{ij}^{R}(\omega,\boldsymbol{R})$（式(8.9.29)、式(8.9.30)）代入，得到

$$\begin{aligned}V(R)=-\frac{\hbar}{\pi}\int_0^{\infty}\frac{\exp\left(-\frac{2\omega}{c}R\right)}{R^2}\frac{\omega^4}{c^4}\Bigg[1+\frac{2}{\frac{\omega}{c}R}+\frac{5}{\left(\frac{\omega}{c}R\right)^2}+\frac{6}{\left(\frac{\omega}{c}R\right)^3}\\ +\frac{3}{\left(\frac{\omega}{c}R\right)^4}\Bigg]\mathrm{Im}(\alpha_1(\omega)\alpha_2(\omega))\mathrm{d}\omega.\end{aligned} \tag{8.9.38}$$

① 请参阅文献[36].

对小距离$\frac{\omega}{c}R\to 0$, $\exp\left(\frac{-2\omega}{c}R\right)\to 1$,只取带头项($\propto R^{-4}$),得

$$V(R)=-\frac{3\hbar}{\pi R^6}\mathrm{Im}\int_0^{\infty}\alpha_1(\omega)\alpha_2(\omega)\mathrm{d}\omega,$$

和式(8.8.12)对应.对大距离$\frac{\omega}{c}R\gg 1$,积分只在$\omega\approx 0$重要,故可将α_1,α_2的余量代为0并提出积分号外,此时积分可算出:

$$\begin{aligned}V(R)&=-\frac{\hbar\alpha_1(0)\alpha_2(0)}{\pi R^2}\int_0^{\infty}\mathrm{d}\omega\,\exp\left(-\frac{2\omega}{c}R\right)\left(\left(\frac{\omega}{c}\right)^4+\frac{2}{R}\left(\frac{\omega}{c}\right)^3+\frac{5}{R^2}\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right.\\&\quad\left.+\frac{6}{R^3}\left(\frac{\omega}{c}\right)+\frac{3}{R^4}\right)\\&=-\frac{23\hbar c}{4\pi R^7}\alpha_1(0)\alpha_2(0).\end{aligned}\tag{8.9.39}$$

这就是 Casimir-Polder 力,对大距离它与R^{-7}成正比,而且没有色散,原因是只有$\omega\approx 0$区给出主要贡献.

8.10 零点能,场真空涨落与 van der Waals 相互作用

在 Heisenberg 求出一维谐振子能量本征值以前10年,Planck 就给出频率为ω的谐振子在温度T和辐射平衡时平均能量的表达式①:

$$U=\frac{\hbar\omega}{\mathrm{e}^{\hbar\omega/kT}-1}+\frac{1}{2}\hbar\omega.\tag{8.10.1}$$

当$T\to 0$时,$U\to\frac{1}{2}\hbar\omega$,Plack 认为这零点能没有意义.但 Einstein 指出,当$kT\gg\hbar\omega$时,如果保留到$\hbar\omega/kT$一次项,就有

$$U\approx\frac{\hbar\omega}{\frac{\hbar\omega}{kT}+\frac{1}{2}\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2}+\frac{1}{2}\hbar\omega\approx kT-\frac{1}{2}\hbar\omega+\frac{1}{2}\hbar\omega=kT,$$

即在$kT\gg\hbar\omega$时,如果要U没有一阶量子修正,就需要零点能.Einstein 认为零点能的存在是可能的[19].零点能不仅在概念上是必要的——它体现了量子力学不确定关系,而且实际上它在固体物理中是可以测量的.当位于晶格上的原子随机振动,其均方位移为$\langle u^2\rangle$时,从晶体上散射的X射线强度是

$$I=I_0\exp\left(-\frac{1}{3}\langle u^2\rangle\boldsymbol{G}^2\right),\tag{8.10.2}$$

$\boldsymbol{G}$是散射的动量转移,I_0是从刚性晶格上的散射强度.指数函数被称为 Debye-Waller 因子.质量为M的经典谐振子的热平均势能是$\frac{3}{2}kT$,因此根据

$$\langle U\rangle=\frac{3}{2}kT=\frac{1}{2}M\omega^2\langle u^2\rangle,$$

式(8.10.2)就可写作

① 比较式(8.7.48).

$$I = I_0 \exp\left[-\frac{2\langle U\rangle}{3M\omega^2}\boldsymbol{G}^2\right] = I_0 \exp\left[-\frac{kT}{M\omega^2}\boldsymbol{G}^2\right]. \tag{8.10.3}$$

如考虑谐振子的零点能，则在 $T\to 0$ 时

$$\langle U\rangle_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega,$$

因而使 $T\to 0$ 时

$$I = I_0 \exp\left(-\frac{\hbar G^2}{M\omega}\right) \tag{8.10.4}$$

实验证明，Debye-Waller 因子指数上的量在 $T\to 0$ 时并不是线性地减小到 0（如式(8.10.3)所示），而是趋近一个不为 0 的数，因而确证了零点能的存在.

在场论中的真空涨落能处理起来更为复杂. 由于场的每一个模式都有零点能 $\frac{1}{2}\hbar\omega$，而在自由空间中单位体积内频率在 $\omega\to\omega+\mathrm{d}\omega$ 间隔中的模数为

$$\mathrm{d}N_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}\mathrm{d}\omega,$$

因而单位体积中在此频率间隔内的零点能是

$$\rho_0(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}\,\frac{1}{2}\,\hbar\omega\mathrm{d}\omega, \tag{8.10.5}$$

总的单位体积零点能是

$$E_0 = \int_0^\infty \rho_0(\omega)\mathrm{d}\omega, \tag{8.10.6}$$

它是发散的. 一个处理方法是，因为它没有物理的可观测后果而把它丢弃；另一个处理办法是将 k 模的能量

$$E_k = \frac{1}{2}\hbar\omega_k(a_k^\dagger a_k + a_k a_k^\dagger) \tag{8.10.7}$$

中的算符乘积作为正规乘积[①]，

$$E_k = \frac{1}{2}\hbar\omega_k : a_k^\dagger a_k + a_k a_k^\dagger := \hbar\omega_k a_k^\dagger a_k, \tag{8.10.8}$$

从而等效地弃去了零点能. 在意识到 Dirac 方程不能预言氢原子光谱的 Lamb 能移（$2S_{1/2}$ 与 $2P_{1/2}$ 能级有很小的劈裂）时，H. A. Bethe 指出，这可能是源于原子中的电子和真空涨落场相互作用. 他在计算中，将自由电子与真空涨落场相互作用的能量（它是无限大）从原子中束缚电子与真空涨落场相互作用的能量（它也是无限大）之中减去. 如果用非相对论量子力学，这个差额仍然是无限大，但是要“缓和”得多. 它是对数发散，即与频率 ω 呈对数关系. 当取积分上限 $\omega\to\infty$ 时，它随 $\ln\omega$ 发散. Bethe 采取了切断措施，取一切断频率 $\omega_c = mc^2/\hbar$ 作为积分上限，结果就是有限的，且这个差额（Lamb 能移）与实验值甚为接近. 此外，这个值对积分上限取值的依赖相当弱. R. P. Feynman 进一步证明，如果用相对论量子力学，这个差额本身就是有限的，且和实验值一致. 这个成功导致 Feynman，Schwinger，Tomonaga（朝永）发展的重正化量子电动力学理论.

---

① 正规乘积是把算符乘积重新排序，使产生算符位于消灭算符左面. 调动一次次序，Fermi 子算符乘以因子 -1，Bose 子算符不变号.

运用真空涨落的另一个领域是由 H. B. G. Casimir 开创的. 他和 Polder 导出了 $V(R)\propto R^{-7}$(式(8.9.36))的结果后,思考一个问题: R^{-7} 的普适性(原子壳层结构的特殊性只作为系数出现)是否有进一步的理由. 在 1947 年的一次散步中,他把自己的结果告诉了 N. Bohr. Bohr 说"那是新的结果,很好."Casimir 接着说,他对结果如此简单而且普适感到困惑. Bohr 回答说可能与零点能有关. 根据 Bohr 的指点,Casimir 接着计算了零点能的变化,重现了他和 Polder 原来的结果[20,21]. 这个成功使 Casimir 进一步去研究真空涨落其他的可观测性质,导出了 Casimir 效应. 在讨论这个效应以前,我们先讨论如何用场的真空涨落得到 Casimir-Polder 势[22],推导涉及的物理是简单的,更精确的推导可以参阅文献[22]的第Ⅲ节. 考虑两个中性的、有内在自由度的体系. 令辐射的波长甚大于任一个体系的尺度,因而偶极近似适用. 但 λ 可以和 R 相比,因此推迟作用是重要的. 体系 2 位于 $\boldsymbol{r}_2$. 在 $\boldsymbol{r}_2$ 处的电场由真空涨落场 $\boldsymbol{E}_0(\omega,\boldsymbol{r}_2)$ 以及 $\boldsymbol{E}_1(\omega,\boldsymbol{r}_2)$ 组成,后者是由 $\boldsymbol{r}_1$ 处的真空涨落场 $\boldsymbol{E}_0(\omega,\boldsymbol{r}_1)$ 诱导产生的自发磁矩 $\boldsymbol{d}_1^{\mathrm{sp}}(\omega)=\alpha_1(\omega)\boldsymbol{E}_0(\omega,\boldsymbol{r}_1)$ 所产生的电场推迟传播到 $\boldsymbol{r}_2$ 的. 这个场由式(8.9.13),式(8.9.14)给出. 作为数量级估计,只取

$$\boldsymbol{E}_1(\omega,\boldsymbol{r}_2)\approx\frac{\alpha_1(\omega)\boldsymbol{E}_0(\omega,\boldsymbol{r}_1)}{R^3}g\left(\frac{\omega R}{c}\right),\tag{8.10.9}$$

此处 g 是无量纲量 $\frac{\omega R}{c}$ 的函数,表示对角度依赖的平均,在变量范围 $0\leqslant\frac{\omega R}{c}<1$ 内数量级为 $O(1)$,且 $g(x)/x$ 在 $x\to0$ 时为有限. 以上涨落变量 $\boldsymbol{d},\boldsymbol{E}$ 的时间振荡因子都不明显写出了. 上述两部分电场之和为 $\boldsymbol{E}_2$,即

$$\boldsymbol{E}_2(\omega,\boldsymbol{r}_2)=\boldsymbol{E}_0(\omega,\boldsymbol{r}_2)+\boldsymbol{E}_1(\omega,\boldsymbol{r}_2),$$

它诱导产生的偶极矩是

$$\boldsymbol{d}_2(\omega)=\alpha_2(\omega)[\boldsymbol{E}_0(\omega,\boldsymbol{r}_2)+\boldsymbol{E}_1(\omega,\boldsymbol{r}_2)],$$

相互作用能是

$$V(\omega,\boldsymbol{R})\approx\frac{1}{2}\alpha_2(\omega)[\boldsymbol{E}_0(\omega,\boldsymbol{r}_2)+\boldsymbol{E}_1(\omega,\boldsymbol{r}_2)]^2.$$

$\boldsymbol{E}_0^2$ 项只与 $\boldsymbol{r}_2$ 有关而和 $\boldsymbol{R}$ 无关,可弃去,$\boldsymbol{E}_1^2$ 是高阶项也可忽略. 因此

$$\begin{aligned}V(\omega,\boldsymbol{R})&\approx\alpha_2(\omega)\boldsymbol{E}_0(\omega,\boldsymbol{r}_2)\cdot\boldsymbol{E}_1(\omega,\boldsymbol{r}_2)\\&=\alpha_2(\omega)\alpha_1(\omega)\boldsymbol{E}_0(\omega,\boldsymbol{r}_1)\cdot\boldsymbol{E}_0(\omega,\boldsymbol{r}_2)\frac{g\left(\frac{\omega R}{c}\right)}{R^3}.\end{aligned}\tag{8.10.10}$$

令系统被封闭于体积为 $\mathscr{V}$ 的盒内,涨落场模式分布是

$$N(\omega)=\mathscr{V}\frac{\omega^2}{c^3}\mathrm{d}\omega,$$

就给出相互作用能

$$V(R)=\frac{1}{R^3}\int\alpha_1(\omega)\alpha_2(\omega)\boldsymbol{E}_0(\omega,\boldsymbol{r}_1)\cdot\boldsymbol{E}_0(\omega,\boldsymbol{r}_2)g\left(\frac{\omega R}{c}\right)N(\omega)\mathrm{d}\omega.$$

在 $\omega<\frac{c}{R}$,即 $\lambda>R$ 时,$\boldsymbol{E}_0(\omega,\boldsymbol{r}_1)$ 可用 $\boldsymbol{E}_0(\omega,\boldsymbol{r}_2)$ 取代,并有

$$\langle\boldsymbol{E}_0^2(\omega,\boldsymbol{r}_2)\rangle\cdot\mathscr{V}=\hbar\omega,$$

因而有

$$V(R) \approx \frac{\hbar}{(cR)^3}\int_0^{c/R} g\left(\frac{\omega R}{c}\right)\alpha_1(\omega)\alpha_2(\omega)\omega^3 \mathrm{d}\omega. \tag{8.10.11}$$

对 R 大(推迟重要)，即 c/R 小时，$\omega<c/R$ 区域是对积分作出主要贡献的区域，因此 $\alpha(\omega)$ 可用静态 $\alpha(0)$ 值取代. 作为数量级估计，有

$$V(R) \approx \frac{\hbar c}{R^7}\alpha_1(0)\alpha_2(0)\int_0^1 g(x)x^3 \mathrm{d}x$$

$$\approx \frac{\hbar c}{R^7}\alpha_1(0)\alpha_2(0), \tag{8.10.12}$$

此处积分是 $O(1)$ 量级. 式(8.10.12)给出 $V(R)\propto R^{-7}$，即 Casimir-Polder 结果.

Yale 大学研究组报告了测量 Casimir-Polder 力的结果[22]. 他们对通过平行板腔的基态 Na 原子的强度作为板间距离的函数进行了测量. Casimir-Polder 力的存在通过基态原子在受限空间的 Lamb 能移得以显示出来，因为在受限空间中的电磁场的真空和自由空间中的不同. 由于真空场随位置而变化，Lamb 能移也随空间变化，它的梯度就对应于作用于原子的、朝向腔壁的 Casimir-Polder 力. G. Barton[23]作了严格的量子电动力学计算，得到理想平行镜面间的球对称基态原子和腔的相互作用势：

$$U(z) = -\sum_e \frac{\pi\,|\,d_{eg}\,|^2}{6\varepsilon_0 L^3}\int_0^\infty \mathrm{d}\rho \frac{\rho^2\cosh(2\pi\rho z/L)}{\sinh(\pi\rho)}\tan^{-1}\left(\frac{\rho\lambda_{eg}}{2L}\right), \tag{8.10.13}$$

此处 z 是原子到腔中心线的距离，求和对所有激发态进行，L 是平行板间的距离，d_{eg} 是电偶极算符在激发态和基态间的矩阵元，ρ 是哑积分变量. 这个表达式可以在两个极端情况下得到简化.

1. van der Waals 极限：$L\ll\lambda$，λ 是主要跃迁 3s→3p 的波长，场的推迟效应可以忽略. 式(8.10.13)可以写作

$$U_{\mathrm{vdW}} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2\langle g\,|\,d^2\,|\,g\rangle}{3L^3}\sum_{\mathrm{odd}\ n}\left[\frac{1}{\left(n-\dfrac{2z}{L}\right)^3}+\frac{1}{\left(n+\dfrac{2z}{L}\right)^3}\right], \tag{8.10.14}$$

它是一个静态的电偶极矩和它在平行镜面的许多像相耦合的能量在各方向上的平均. 近似的成立可以估计如下. 因为原子位于基态，跃迁 3s→3p 只能是虚过程，根据不确定性原理，虚光子的寿命是 $\Delta t\leqslant\frac{1}{\Delta\omega}=\frac{1}{2\pi c/\lambda}=\frac{\lambda}{2\pi c}$. 推迟效应可以忽略的条件是 $L<\frac{\lambda}{2\pi}$.

2. 对于 $L\gg\frac{\lambda}{2\pi}$ 当原子不是很接近一个板时推迟效应是重要的. 式(8.10.13)可以用 Casimir-Polder 势近似：

$$U_{\mathrm{CP}} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\pi^3\ \hbar c\alpha(0)}{L^4}\left[\frac{3-2\cos^2\dfrac{\pi z}{L}}{8\cos^4\dfrac{\pi z}{L}}\right]. \tag{8.10.15}$$

$\alpha(0)$ 的出现强调 Lamb 能移的修正中真空谱低频部分的重要性. 比较式(8.10.14)和式(8.10.15)我们看到从瞬时 van der Waals 势的 L^{-3} 依赖性改变为具有推迟效应的 Casimir-Polder 势的 L^{-4} 依赖性. 这个势的梯度给出原子和腔壁间在 L 大时的 Casimir-Polder 力，它正是实验要测量的. 在这里需要说明一点，处于激发态的原子能够辐射真实光子，它的寿命较长，可以对原子有较强的影响. 腔对于激发态原子的牵引很大，它会掩盖住 Lamb 能移的改变. 因此 Casimir-Polder 力的精确测量只能用基态原子. 图 8.21 绘出在厚度为 1μm 的平行板腔中的 Na 原子基态能级的移动，作为和腔中心线距离的函数. (a)代表真

实势，(b)代表瞬时 van der Waals 势，(c)代表 Casimir-Polder 势. 能移正是原子在平行板腔中经受的势. 图 8.22 给出实验装置的示意图.

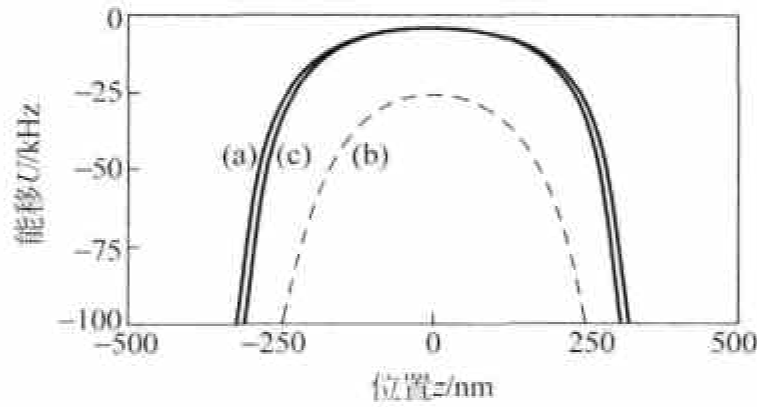


图 8.21 在厚度为 1μm 的平行板腔中的 Na 原子基态能移. 取自[22]

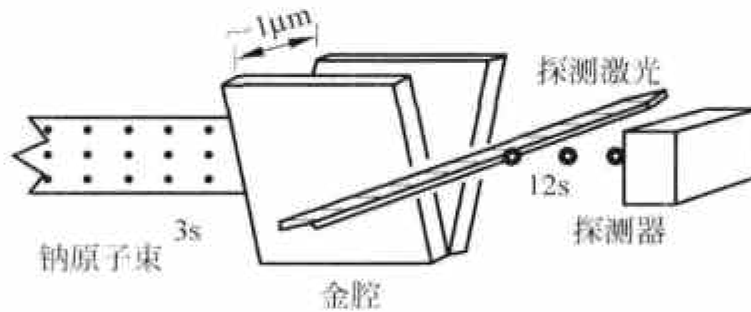


图 8.22 实验装置示意图. 取自[22]

钠原子从炉的垂直狭缝(1cm 长)扩散出来，进入 10^{-7} torr 的真空. 原子进入楔形的金腔，金腔 3cm 高，8cm 长，宽度可以在 0.5～8μm 间调节. 它们在图 8.20 中所示的势中被偏转. 打到腔壁上的原子被吸附的几率很高. 在中心线附近通过的原子最终将从腔中逸出. 它们被两束叠加的激光共振激发到 12s 态，并被场电离，被通道电子倍增器探测. 激光束是聚焦的，使得探测的范围约为 200μm 大小的高度，对应精确确定的腔的宽度. 透射原子的强度 $I(L)$ 作为不同腔的宽度 L 的函数被记录下来. 用 $I(6\mu m)$ 归一化，得出相对透射率 $T(L)=I(L)/I(6\mu m)$. 不透明度(opacity)定义为 $1/T(L)$. 结果绘于图 8.23. 这是 Monte Carlo 计算结果，原子在炉中满足 Maxwell-Boltzmann 速度分布，随机飞进腔中，在给定的势作用下传播. 为了更好地区别不同的势，将 L 推延到 0.7μm，结果示于图 8.24. 可以明显看出瞬时 van der Waals 势应被排除，有推迟效应的 Casimir-Polder 势是精确 QED 势的很好近似.(图 8.23 和图 8.24 中的曲线(a)相当于精确的 QED 势，曲线(b)相当于瞬时 van der Waals 势，曲线(c)相当于无相互作用.)

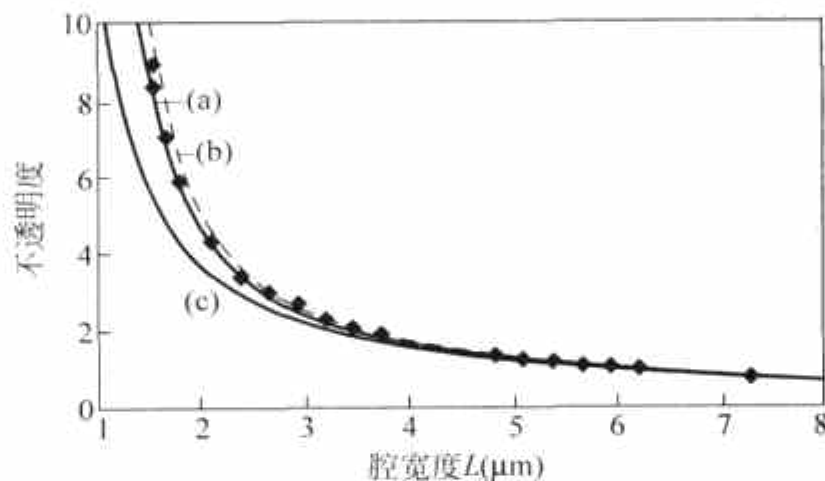


图 8.23 不透明度和腔宽度的依赖关系. 取自[22]

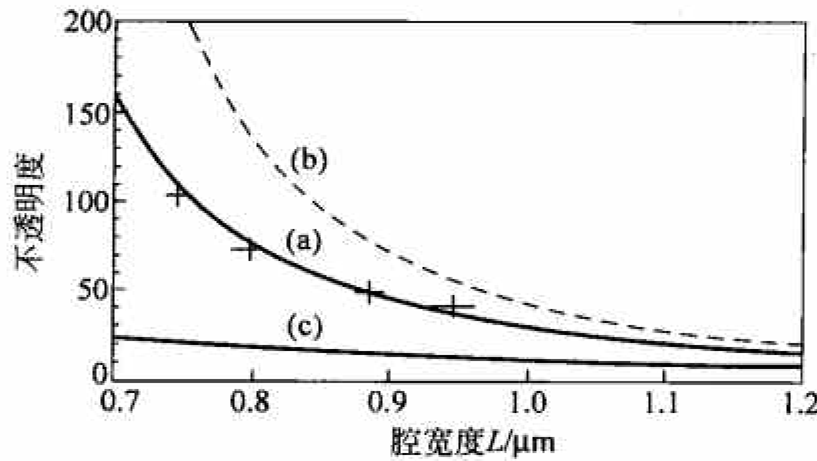


图 8.24　不透明度和腔宽度的依赖关系，L 的变化范围推延到 0.7μm. 取自[22]

8.11　Casimir 效应

考虑两块 $L\times L$ 完全导体，距离为 d(图 8.25). 以边长方向为 x,y 轴，d 方向为 z 轴. 盒中电磁波模式为

$$\omega_{lmn}=\pi c\left(\frac{l^2}{L^2}+\frac{m^2}{L^2}+\frac{n^2}{d^2}\right)^{1/2},\qquad(8.11.1)$$

此处 l,m,n 是正整数或 0. 盒中场的零点能是

$$\begin{aligned}E_0(d)&=\sum_{l,m,n}{}'2\times\frac{1}{2}\hbar\omega_{lmn}\\&=\sum_{l,m,n}{}'\pi\hbar c\left(\frac{l^2}{L^2}+\frac{m^2}{L^2}+\frac{n^2}{d^2}\right)^{1/2}.\end{aligned}\qquad(8.11.2)$$

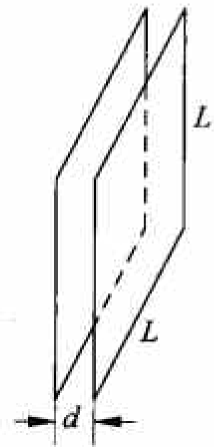


图 8.25　两块 $L\times L$ 完全导体，距离为 d

式中因子 2 来源于每一个模式 $l,m,n\neq0$ 的两个独立偏振态. 求和号上的撇号“′”意为如果三个指标 l,m,n 中的一个为 0 时，不用因子 2，因为对这种模式只有一个偏振态①. 设 $d\ll L$，对 l 和 m 求和就可以用积分代替，即对 k_x,k_y 已没有任何限制，亦即

$$E_0=\frac{\hbar cL^2}{\pi^2}\sum_n{}'\int_0^\infty\mathrm{d}k_x\int_0^\infty\mathrm{d}k_y\left(k_x^2+k_y^2+\frac{\pi^2n^2}{d^2}\right)^{1/2}.\qquad(8.11.3)$$

在体积 $L\times L\times d$ 的自由空间中的零点能为

$$E_0(\text{free})=\frac{\hbar cL^2d}{\pi^3}\int_0^\infty\mathrm{d}k_x\int_0^\infty\mathrm{d}k_y\int_0^\infty\mathrm{d}k_z(k_x^2+k_y^2+k_z^2)^{1/2},\qquad(8.11.4)$$

此处所有模式都不受局限. $E_0-E_0(\text{free})$ 就代表在 z 方向对模式的局限给零点能带来的变化，即

$$V(d)=E_0-E_0(\text{free})=\frac{L^2\hbar c}{\pi^2}\left[\sum_n{}'\int_0^\infty\mathrm{d}k_x\int_0^\infty\mathrm{d}k_y\left(k_x^2+k_y^2+\frac{\pi^2n^2}{d^2}\right)^{1/2}-\frac{d}{\pi}\int_0^\infty\mathrm{d}k_x\int_0^\infty\mathrm{d}k_y\int_0^\infty\mathrm{d}k_z(k_x^2+k_y^2+k_z^2)^{1/2}\right].$$

变换到极坐标 $k_x^2+k_y^2=r^2$，$\int_0^\infty\mathrm{d}k_x\int_0^\infty\mathrm{d}k_y=\frac{\pi}{2}\int_0^\infty\mathrm{d}r\,r$，上式变为

① 如果 n 为 0，即 $k_z=\frac{\pi n}{d}=0$，波在 xy 平面传播，偏振矢量只能在平行于 xy 平面且垂直于 $\boldsymbol{k}$ 的方向.

$$V(d)=\frac{L^2\hbar c}{\pi^2}\frac{\pi}{2}\Big[\sum_n{}'\int_0^\infty dr\, r\Big(r^2+\frac{n^2\pi^2}{d^2}\Big)^{1/2}$$
$$-\frac{d}{\pi}\int_0^\infty dk_z\int_0^\infty dr\, r(r^2+k_z^2)^{1/2}\Big].$$

令 $\xi=\frac{r^2d^2}{\pi^2}$，$\eta=\frac{k_zd}{\pi}$，上式变为

$$V(d)=\frac{L^2\hbar c\pi^2}{4d^3}\Big(\sum_n{}'\int_0^\infty d\xi(\xi+n^2)^{1/2}-\int_0^\infty d\eta\int_0^\infty d\xi(\xi^2+\eta^2)^{1/2}\Big). \tag{8.11.5}$$

这是两个发散积分之差. 定义

$$F(u)\equiv\int_0^\infty d\xi(\xi+u^2)^{1/2}, \tag{8.11.6}$$

式(8.11.5)就可写为

$$V(d)=\frac{\pi^2\hbar cL^2}{4d^3}\Big[\frac{1}{2}F(0)+\sum_{n=1}^\infty F(n)-\int_0^\infty d\eta F(\eta)\Big]. \tag{8.11.7}$$

级数与积分之差由 Euler-Maclaurin 公式给出：

$$\sum_{n=1}^\infty F(n)-\int_0^\infty d\eta F(\eta)=-\frac{1}{2}F(0)-\frac{1}{2!}B_2F'(0)-\frac{1}{4!}B_4F'''(0)-\cdots, \tag{8.11.8}$$

式中的 Bernoulli 数 B_ν 定义为

$$\frac{y}{e^y-1}=\sum_{\nu=0}^\infty B_\nu\frac{y^\nu}{\nu!}, \tag{8.11.9}$$

且 $B_2=\frac{1}{6}$，$B_4=-\frac{1}{30}$，等等. 积分仍是发散的. 原因是对波长比原子尺度还小的模式，完全导体近似就不再适用了. 因此需要引入一个切断函数 $f(k)$，它对波矢大小超过临界值(原子尺度的倒数)k_m 时函数值迅速降至 0，而对 $k\lesssim k_m$ 时，函数值为 1(图 8.26). 这样积分就可以写作

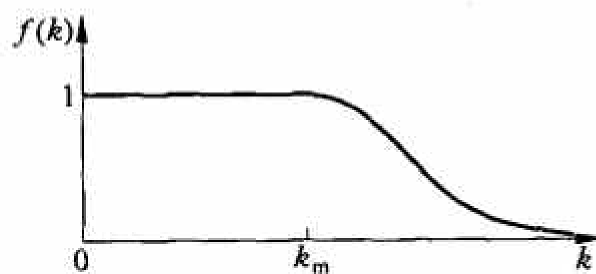


图 8.26 切断函数

$$F(u)=\int_0^\infty d\xi(\xi+u^2)^{1/2}f\Big(\frac{\pi}{d}\sqrt{\xi+u^2}\Big),$$

f 的宗量就是 $\boldsymbol{k}$ 波矢的大小. 变换积分变量为 $\zeta=\xi+u^2$，有

$$F(u)=\int_{u^2}^\infty d\zeta(\zeta)^{1/2}f\Big(\frac{\pi\sqrt{\zeta}}{d}\Big), \tag{8.11.10}$$

此处 F 对 u 的依赖只通过积分下限，故有

$$F'(u)=-2u^2f\Big(\frac{\pi u}{d}\Big). \tag{8.11.11}$$

在求 F 对 u 的更高阶微商时，注意到 $f(0)=1$ 并 $f(k)$ 的各阶微商在 $k=0$ 处为 0. 因此 $F(0)=0$，$F'(0)=0$，$F'''(0)=-4$，更高阶微商在 $k=0$ 处都为 0. 这样 Euler-Maclaurin 级数就可求出，而得到

$$\frac{V(d)}{L^2}=\frac{\hbar c\pi^2}{d^3}\frac{B_4}{4!}=-\frac{\pi^2}{720}\frac{\hbar c}{d^3}. \tag{8.11.12}$$

这个结果与切断频率无关，是个"很干净"的结果. 平行板单位面积上的力是

$$\mathscr{F} = -\frac{\pi^2}{240}\frac{\hbar c}{d^4}. \tag{8.11.13}$$

这是个很微弱的力. 如果 d 用 μm 表示,这个力的大小是 $-\frac{0.013}{(d_{\mu m})^4}$dyn/cm^2. Sparnaay[24] 于1958年在实验中测出了它,不仅测出力的大小,而且测出了力与距离的关系.

关于本节内容请参阅文献[25].

8.12　强耦合机制下的腔量子电动力学

腔量子电动力学的要旨是增强原子和光子间的耦合. 在自由空间,光子仅在通过原子时短暂相互作用. 当原子和光子都被捕获在腔中时,耦合就变得强许多. 在腔中原子可以发射一个光子,然后再把它吸收,这可以重复发生. 近年来物理学家试图研究在强相互作用体制下的腔量子电动力学,并取得重要的进展. 在这种体制下,在原子和光子逸出腔之前会发生许多次 Rabi 振荡. 如果能够让原子在腔中的驻波波腹处静止,就得到最强的耦合. 这个想法已经在荷兰的 Delft 研究组(I. Chiorescu,J. E. Mooij 等)[32] 和 Yale 大学研究组(A. Wallraff 等)[33] 实现.

Delft 研究组研究的是超导量子比特("原子")和 SQUID(作为腔的谐振子模式)的缠绕,以及探测量子比特状态的探测系统. 缠绕体系的产生和控制是通过微波谱学的方法以及探测耦合系统的 Rabi 振荡实现的. 图 8.27 所示的装置是由电子束刻蚀和金属蒸发镀膜制造的. SQUID 是一个大环用两个 Josephson 结隔断,它和右面的小环(由三个串联的 Josephson 结组成,这就是通量量子比特)融合在一起. 外加的垂直磁场将量子比特置于半个磁通量子 $\Phi_0/2$ 附近. 通量量子比特就成为有两个"自旋向上"$|\uparrow\rangle$ 和"自旋向下"$|\downarrow\rangle$ 状态的可控二能级系统,相应于持续电流"顺时针方向"和"逆时针方向"流动①,二者间通过隧穿耦合. 微波场由同平面的波导(图中标明微波线)提供,它和量子比特通过电感耦合. 电流线(I)送出读出的脉冲,而体制改变由电压线(V)探测②. 量子比特和 SQUID 间的强耦合使得量子比特和谐振子体系的耦合动力学研究成为可能.

量子比特环的动力学由耦合能量 ε 和隧穿劈裂 Δ 决定. 当超导体跨越三个结的相位差 γ_q 等于 π 时,环是一个对称双阱,状态 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$ 是简并的,在此对称点 $\varepsilon=0$. 隧穿解除了简并,现在线性组合 $|\pm\rangle$ 成为能量本征态,它们的能量差是 Δ. SQUID 偏置电流的改变(相应通量偏离 $\Phi_0/2$)导致能量本征态的能量差变为 $\sqrt{\varepsilon^2+\Delta^2}$. 量子比特系统的 Hamilton 量为

$$H_q = -\varepsilon\frac{\sigma_z}{2} - \Delta\frac{\sigma_x}{2} \tag{8.12.1}$$

SQUID 系统由以下 Hamilton 量描述:

$$H_r = \hbar\omega_r\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right), \tag{8.12.2}$$

此处 $\omega_r = 1/\sqrt{LC}$,L 和 C 是 SQUID 电路的有效电感和电容,$a^\dagger a$ 是光子数算符. 量子比特-SQUID 耦合源于共享电路的电流分布,由相互作用 Hamilton 量描述:

$$H_{qr} = \lambda\sigma_x(a+a^\dagger), \tag{8.12.3}$$

此处 λ 是耦合强度. 记耦合系统的状态为 $|\beta n\rangle$,β 代表量子比特的状态($\beta=0$ 代表基态,$\beta=1$

① 见 6.3 节和图 6.8. 近期的发展可参阅文献[35].

② SQUID 转换到有限电压体制的几率与激发态布局数有关,当 Rabi 振荡发生时增大或减小.

代表激发态)，n 代表谐振子的状态，$n=0,1,2,\cdots$. 能级绘于图 8.27(b)的插图中. 系统从状态$|00\rangle$开始. 通过持续的共振脉冲可以达到不同的$|\beta n\rangle$叠加态. 施加不同频率的长微波脉冲可以测量 SQUID 转换到有限电压体制的几率，后者与激发态布居成正比. 施加一个短的电流脉冲(I)，监测 SQUID 是否转换到有限电压体制. 结果绘于图 8.28. 上面的扫描曲线(在π脉冲后)表示系统首先被激发到$|10\rangle$，并从此衰变到$|01\rangle$(红边带)或$|00\rangle$(Larmor 频率). 下面的扫描曲线(在 2π 脉冲后)系统被转动回$|00\rangle$，并从此被激发到$|10\rangle$或$|11\rangle$(蓝边带). 共观察到三个共振频率(图 8.27(b)). 除在量子比特的$|00\rangle\leftrightarrow|10\rangle$间的 Rabi 振荡频率外，还观察到相应于$|10\rangle\leftrightarrow|01\rangle$的红边带和相当于$|00\rangle\leftrightarrow|11\rangle$的蓝边带. 这给出了量子比特和 SQUID 间强耦合的明证.

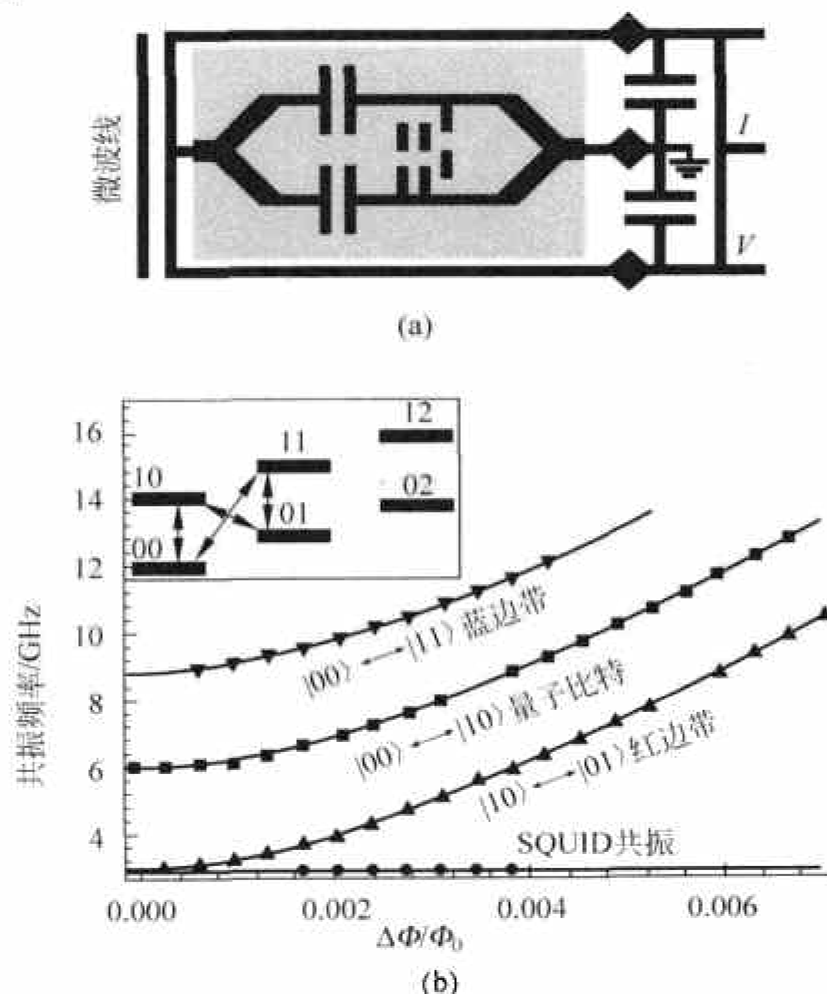


图 8.27 量子比特-SQUID 装置和能谱. 取自[32]

(a) 系统的原子力显微图；图中大环是 SQUID，右方通过三个结的小环是通量量子比特. 小环与大环的面积比是 0.37. 左方的微波线是波导的一部分，通过它提供微波场. 图中的长度标度表示 1μm. (b) 共振频率和 $\Delta\Phi=\Phi-\Phi_0/2$ 的关系. (b)中插图：给定偏置下的能级图.

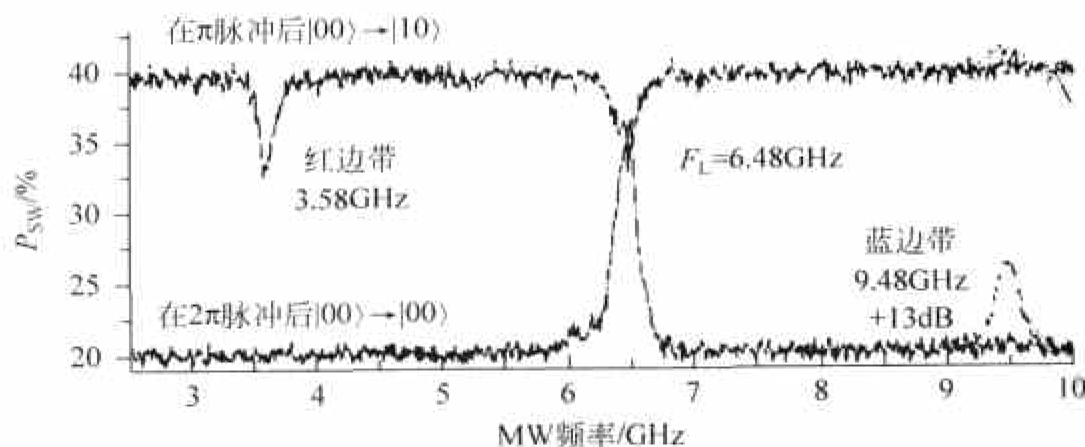


图 8.28 能级的谱学表征. 取自[32]

Yale 大学的研究组使用了芯片上的腔和一个 Cooper 对盒，示于图 8.29. 一维传输线共振腔是刻蚀制造的，有超导平面波导的全波段. Cooper 对盒(量子比特)放置在超导线之间并与中心线电压驻波波腹处电容耦合，由此产生量子比特与腔中光子间的强电偶极相互作用. Cooper 对盒是一对小的 Josephson 结联在一个环中，可以通过外加磁通调节有效 Josephson 能量[35]. 输入和输出信号通过中心线与传输线的电容隙与共振腔相耦合. 这样就能够对腔的振幅和相位状态进行测量并通过直流或射频脉冲操控量子比特状态. 腔的 Hamilton 量仍由式(8.12.2)给出. 在操作温度 $T<100\text{nK}$ 时共振腔几乎处于基态，热布居 $\langle a^{\dagger}a\rangle<0.06$. 腔中平均光子寿命超过 100ns. 共振腔的真空涨落给出中心导体和接地平面间的电场为 $E_{\text{rms}}\approx0.2\text{V/m}$，比通常的三维共振腔要大几百倍. 耦合量子比特-共振腔体系的等效电路示于图 8.30.

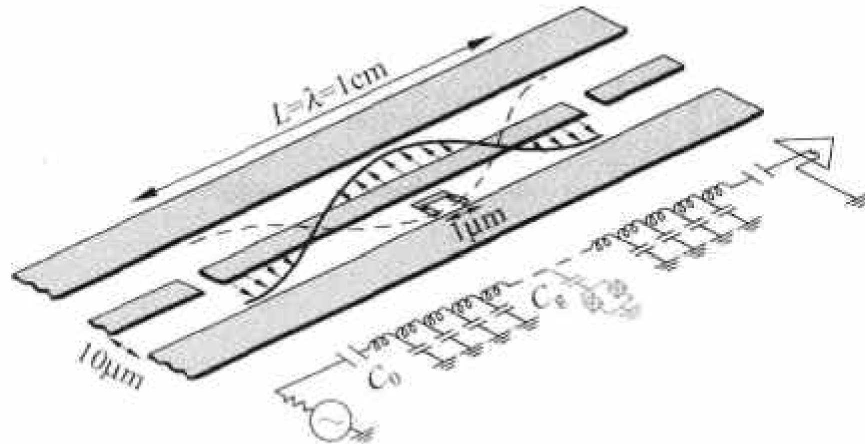


图 8.29　耦合量子比特-共振腔体系示意图. 取自[35]

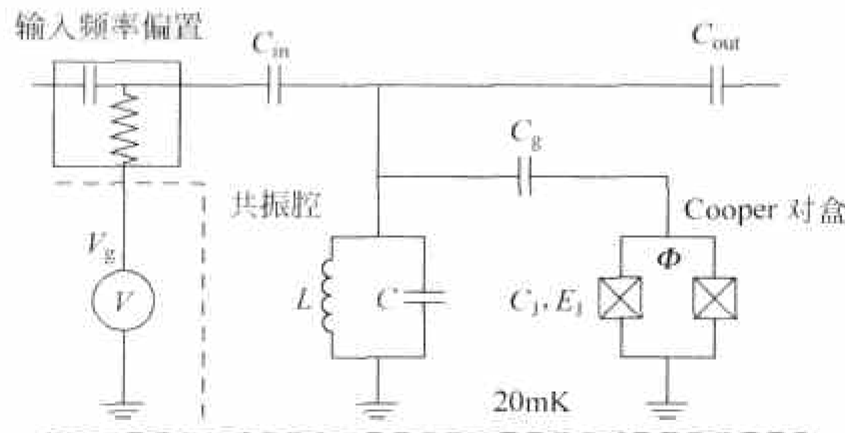


图 8.30　耦合量子比特-共振腔体系的等效电路图. 取自[33]

输入门电压 V_g 感应门电荷 n_g，它控制 Cooper 对盒的静电能量 $E_{\text{el}}=4E_C(1-n_g)$，此处 E_C 是电容能量. Josephson 能量是 $E_J=E_{J,\max}\cos\pi\dfrac{\Phi}{\Phi_0}$. 如在文献[35]中指出的，相关的自由度是在岛(Cooper 对盒)上的 Cooper 对数目. 在电荷体制下，$4E_C\gg E_J$；将门电荷限制在[0,1]区间，岛上只有一对相邻的电荷态是相关的. 这样 Hamilton 量就约化为二能级系统的

$$H_a=-E_{\text{el}}\frac{\sigma_x}{2}-E_J\frac{\sigma_z}{2},\tag{8.12.4}$$

此处基态和激发态由 Pauli 自旋量 $|\downarrow\rangle$ 和 $|\uparrow\rangle$ 代表. 它们的能量差 $\hbar\omega_a$ 可以通过改变外加通量和门电压调节. Cooper 对盒和共振腔中存储的光子通过耦合电容 C_g 相耦合. 共振腔的真空电压涨落 V_{rms} 改变 Cooper 对的能量，改变大小是 $\hbar g=dE_{\text{rms}}$，此处 d 是电偶极矩. 耦合体系由 Jaynes-Cummings Hamilton 量描述[35]：

$$H_{\mathrm{JC}} = H_a + H_r + \hbar g(a^{\dagger}\sigma^{-} + a\sigma^{+}). \tag{8.12.5}$$

记共振腔的裸共振频率为 ω_r. 当失谐 $\Delta=\omega_a-\omega_r$ 为零时,耦合体系的本征态是线性组合 $|\pm\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0,\uparrow\rangle\pm|1,\downarrow\rangle)$,相应的能量为 $E_{\pm}=\hbar(\omega_r\pm g)$,此处 0,1 指共振腔状态,↑,↓指量子比特状态. 在大失谐情况下,Hamilton 量对角化为[35]

$$H \approx \hbar\left(\omega_r + \frac{g^2}{\Delta}\sigma_z\right)a^{\dagger}a + \frac{1}{2}\hbar\left(\omega_a + \frac{g^2}{\Delta}\right)\sigma_z. \tag{8.12.6}$$

共振腔的跃迁频率现在取决于量子比特的状态,因此测量跃迁频率就能得知量子比特的状态. 类似地,量子比特的能级间距与共振腔中的光子数有关.

测量作为频率 ν_{RF} 函数的微波探测束的传输,将大失谐条件下的归一的传输谱示于图 8.31(a). 观察到相应 $|0,\downarrow\rangle\to|1,\downarrow\rangle$ 跃迁的跃迁频率 $\omega_r-\frac{g^2}{\Delta}$. 在共振情况下 $\Delta=0$ 和 $n_g=1$ 时图 8.31(b)给出相应于 $|0,\downarrow\rangle\leftrightarrow|\pm\rangle$ 跃迁 Rabi 频率的劈裂.

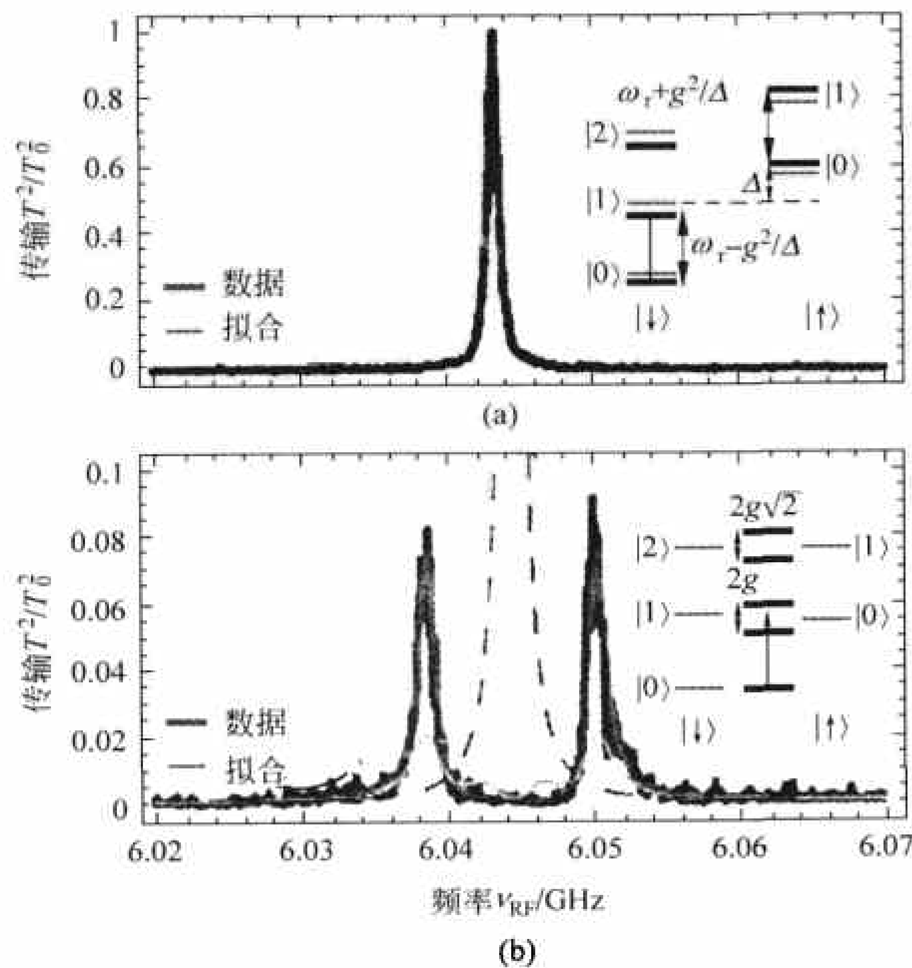


图 8.31 取自[33]

(a) 大失谐透射谱;(b) 共振透射谱,显示 Rabi 模劈裂. 虚线表示 $g=0$($|0,\uparrow\rangle$与$|1,\downarrow\rangle$简并)情况的计算结果

这些实验证明在 Josephson 电路中高水平的相干性和可控性是可能的,这对量子通信和量子计算是很重要的.

参考文献

[1] Walls D F, G. J. Milburn. Quantum Optics. Berlin, Springer, 1994.

[2] Haroche S, Raimond J M. In: Cavity Quantum Electrodynamics. Berman P R ed. Boston: Academic, 1994.

Raimond J M, Brune M, Haroche S. Rev Mod Phys, 2001, 73: 565.
[3] Haroche S, Kleppner D. Physics Today, 1989, 42(1): 24.
[4] Jaynes E T, Cummings F W. Proc IEEE, 1963, 51: 89.
[5] Haroche S. In: New Trends in Atomic Physics. Grynberg G, Stora R, eds. Amsterdam: Elsvier, 1984.
[6] Rempe G, Walther H, Klein N. Phys Rev Lett, 1987, 58: 353.
[7] Hulet R G, Hilfer E S, Kleppner D. Phys Rev Lett, 1985, 55: 2137.
[8] Jhe W, Anderson A, Hinds E A, Meshede D, Moi L, Haroche S. Phys Rev Lett, 1987, 58: 666.
[9] Goy P, Raimond J M, Gross M, Haroche S. Phys Rev Lett, 1983, 50: 1903.
[10] Krause J, Scully M O, Walther H. Phys. Rev, 1987, A 36: 4547.
[11] Brune M, Raimond J M, Goi P, Davidovich L, Haroche S. Phys Rev Lett, 1987, 59: 1899.
[12] Brune M, Nussenzveig P, Schmide-Kaler F, Bernardot F, Maali A, Raimond J M, Haroche S. Phys Rev Lett, 1994, 72: 3339.
[13] Haroche S, Brune M, Raimond J M. J Phys II (France), 1992, 2: 659.
[14] Landau L D, Lifshitz E M. Statistical Physics. 3rd edition. Part 1. Oxford: Pergamon Press, 1980.
[15] Landau L D, Lifshitz E M. Electrodynamics of Continuous Media. 2nd edition. Oxford: Pergamon Press, 1984.
[16] Barash Y S, Ginzburg V L. Sov Phys Uspekhi, 1975, 18: 305.
[17] Landau L D, Lifshitz E M. The Classical Theory of Fields. 4th edition. Oxford: Pergamon Press, 1975.
[18] Lifshitz E M, Pitaevskii L P. Statistical Physics, Part 2. Oxford: Pergamon Press, 1980.
[19] Milonni P W, Shih M-L. Am J Phys, 1991, 59: 684.
[20] Milonni P W, Shih M L. Contemp Phys, 1992, 33: 313.
[21] Casimir H B G, Polder D. Phys Rev, 1948, 73: 360.
[22] Sukenik C L, Boshier M G, Cho D, Sandoghdar V, Hinds E A. Phys Rev Lett, 1993, 70: 560.
[23] Barton G. Proc Roy Soc London, 1987, A410: 175.
[24] Sparnaay S J. Physica, 1958, 24: 751.
[25] Itzykson C, Zuber J B. Quantum Field Theory. New York: McGraw Hill, 1980.
[26] Mabuchi H, Doherty A C. Science 2002, 298: 1372.
[27] Wiseman H M, Milburn G J. Phys Rev, 1993, A 47: 642.
[28] Turchette Q A, et al. Appl Physics 1955, B 60: S1.
[29] Hagley E, et al. Phys Rev Lett, 1997, 79: 1.
[30] Rauschenbeutel A, et al. Science, 2000, 288: 2024.
[31] Rauschenbeutel A, et al. Phys Rev, 2001, A64: 050301.
[32] Chiorescu I, et al. Nature, 2004, 431: 159.
[33] Wallraff A, et al. Nature 2004, 431: 162.
[34] Mooij J E, et al. Science 1999, 285: 1036; van der Wal C H, et al. Science, 2000, 290: 773.
[35] Blais A, et al. Phys Rev 2004, A 69: 062320.
[36] 王育郊,葛墨林. 大学物理中的前沿问题. 兰州: 兰州大学出版社, 1987.
[37] Nogues G, Rauschenbeutel A, Osnaghi S, Brune M, Raimond M J., Haroche S. Nature, 1999, 400: 239.
[38] Gleyes S, Kuhr S, Guelin C, Bernu J, Deliglise S, Hoff U B, Brune M, Raimond M J. Haroche S. Nature, 2007, 466: 297.

第9章
量子 Hall 效应

在量子 Hall 效应研究的 20 年期间已经授予过两次 Nobel 物理奖. 在整数量子 Hall 效应的研究中发现 Hall 电阻的量子化值完全由基本常数表达. 在凝聚态物理的研究中所测的数值与固体材料的特性无关,这属于例外情况. 这个现象反映了物理学中基础的规律性. 在 9.2,9.3 节中我们给出为理解量子 Hall 效应所必需的一些理论基础,即 Landau 能级和磁通量子化. 在 9.4 节中介绍整数量子 Hall 效应的实验结果和理论诠释,包括对于这个现象反映基础规律的 Laughlin 的规范不变性论据.

分数量子 Hall 效应对实验物理学家的经验和造诣要求很高,而其理论诠释更富挑战性. 在整数量子 Hall 效应中量子化 Hall 电阻对应被填满的 Landau 能级数,那么在分数量子 Hall 效应中一个 Landau 能级填充 1/3,2/5 等又有何特殊之处呢? 想要写出这样状态的近似波函数不仅要求物理的洞察力,即理解到这样的状态是电子间相互作用形成的强关联的集体态,而且要求辛勤地去设想波函数的形式并一步一步使用试探波函数以验证其正确性,结果产生的 Laughlin 波函数比人们所能期望的还要准确得多. 除基态外,也获得了原激发(分数电荷的准粒子和准空穴)的波函数. 大量高质量的研究成果使人们认识到分数量子 Hall 态是一种新型量子流体的状态. 在 9.5 节中介绍这些发展.

其他各节讨论理论概念的进一步发展. 例如,整数和分数量子 Hall 效应可以在复合 Bose 子图画基础上达到统一的理解,复合 Bose 子是电子和奇数磁通量子束缚在一起形成的. 此外,还讨论了量子 Hall 物质的整体相图.

在这个方向上已经有了许多新的、概念性的进展. 我们的重点仍是和量子力学基本原理有密切联系的进展,其他方面许多前沿的进展读者可以阅读有关的参考文献.

9.1 经典 Hall 效应

将长方条形导体沿其长度(x 轴)加一电场 E_x,它产生的电流密度为

$$j_x = nev, \tag{9.1.1}$$

此处 n 是载流子密度,e 及 v 分别为其电荷及速度. 在 z 方向加均匀磁场 B,电流即发生偏转,在垂直于 y 轴的两个侧面上积累异号电荷,这些电荷产生横向电场 E_y. 当 $E_y=\frac{1}{c}vB$ 时

(c 为光速),电流在 y 方向就不再受力.当电流稳定后测出 j_x,E_y 和 B.它们之间的关系是

$$E_y = j_x \frac{B}{nec}.$$

定义电阻率 ρ_H 为

$$\rho_H = \frac{E_y}{j_x}, \tag{9.1.2}$$

据 E_y 与 B 的关系可得

$$\rho_H = \frac{B}{nec}. \tag{9.1.3}$$

通过测量各量能推出载流子浓度.如载流子为电子,则 E_y 沿 $-y$ 方向;载流子为空穴,E_y 沿 $+y$ 方向.

在 y 轴方向的电势差称为 Hall 电压 U_H,它和 E_y 的关系是 $U_H=E_yL_y$,此处 L_y 是导体横向宽度.从式(9.1.2)可知 U_H 和 B 成正比,这个线性关系示于图 9.1.

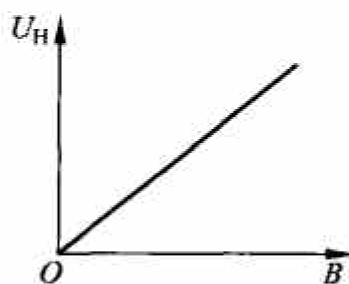


图 9.1　经典 Hall 效应

这个效应是 1879 年 Edwin H. Hall 发现的.发现后约 100 年,Klaus von Klitzing 和 Dorda,Pepper 发现了量子 Hall 效应[1,2].由于这项发现,Klitzing 获得了 1985 年诺贝尔物理学奖.1982 年崔琦、H. L. Störmer 和 A. Gossard[3,4]发现了分数量子 Hall 效应,崔琦、H. L. Störmer 和 R. Laughlin 获 1998 年诺贝尔物理学奖.

9.2　电子在均匀磁场中的运动,Landau 能级

带电粒子在均匀磁场中运动的量子力学问题是 L. D. Landau 在 1930 年解决的.沿 z 方向均匀磁场 B 的矢量势选为

$$A_x = -By, \quad A_y = A_z = 0. \tag{9.2.1}$$

Schrödinger 能量本征方程是

$$\hat{H}\psi = \frac{1}{2m}\left[\left(\hat{p}_x + \frac{eB}{c}y\right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right]\psi - \mu s_z B\psi = E\psi. \tag{9.2.2}$$

式中 s_z 是电子自旋 z 分量,$-\mu s_z B$ 是电子自旋磁矩在磁场 B 中的能量.由于 Hamilton 量中不含坐标 x 和 z,因此 p_x 和 p_z 都是运动常数,求解时可将 ψ 写作

$$\psi(x,y,z) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_z z)\right]\chi(y). \tag{9.2.3}$$

将式(9.2.3)代回式(9.2.2)即得$\chi(y)$所满足的方程:

$$\chi''(y) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[\left(E + \mu s_z B - \frac{p_z^2}{2m}\right) - \frac{1}{2}m\omega_c^2(y-y_0)^2\right]\chi(y) = 0, \tag{9.2.4}$$

式中

$$y_0 = -\frac{cp_x}{eB}, \tag{9.2.5}$$

$$\omega_c = \frac{eB}{mc}, \tag{9.2.6}$$

ω_c 是电子在磁场 B 中的进动频率. 式(9.2.4)正是一维谐振子所满足的方程. 因此式中 $E+\mu s_z B-\frac{p_z^2}{2m}$ 正是能量本征值 $\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$. 故有

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c+\frac{p_z^2}{2m}-\mu s_z B, \tag{9.2.7}$$

相应的本征函数是

$$\chi_n(y)=\frac{1}{\pi^{1/4}a^{1/2}\sqrt{2^n n!}}\exp\left[-\frac{(y-y_0)^2}{2a^2}\right]H_n\left(\frac{y-y_0}{a}\right), \tag{9.2.8}$$

式中 H_n 是 Hermite 多项式，$a=\sqrt{\hbar/m\omega_c}$. 有趣的是 p_x 并不进入能量的表达式，而是通过式(9.2.5)确定谐振子的平衡位置. 若粒子在 x 方向的运动不受局限，则 p_x 可以连续取值. 若 x 方向的范围由长 L_x 所局限，则 p_x 值是分立的，即

$$p_x=\frac{2\pi\hbar}{L_x}l, \tag{9.2.9}$$

此处 $l=0,\pm1,\pm2,\cdots$. 相应的平衡位置也是分立的，其间隔为

$$\Delta y_0=\frac{c}{eB}\frac{2\pi\hbar}{L_x}. \tag{9.2.10}$$

在 L_y 长度内能排下的平衡位置数目为

$$\frac{L_y}{\Delta y_0}=\frac{eBL_xL_y}{hc},$$

而在 xy 平面单位面积内的平衡位置数目，亦即单位面积内态的数目为

$$n_B=\frac{eB}{hc}. \tag{9.2.11}$$

为了对于 Landau 能级的简并度有一个概念，考虑在一个 Landau 能级被完全填充的样品的单位面积能级数 $n_B=\frac{eB}{hc}=(2\pi a_0^2)^{-1}$，此处 $a_0=\left(\frac{\hbar c}{eB}\right)^{1/2}$ 被称为“磁长度”，是量子 Hall 效应中长度的常用标准. 在典型的量子 Hall 效应实验中 a_0 约为 50～100Å，即 n_B 的量级为 $10^{11}\,\mathrm{cm}^{-2}$. 典型样品的面积为 $10^{-3}\,\mathrm{cm}^2$，因此 Landau 能级简并度的量级是 10^8.

若电子被局限于二维空间(xy 平面)中运动，即没有 z 方向的自由度，且磁场足够强以使电子完全极化($-\mu s_z B$ 为常数)，能量本征值即可简单地写作

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c. \tag{9.2.12}$$

能级是分立的，它们称为 Landau 能级. 对于某一个 Landau 能级，在 y 方向的平衡位置数由式(9.2.11)给出，因此 Landau 能级的简并度也就是 n_B.

沿 $-z$ 轴的均匀磁场 B 也可以选用矢量势的对称规范：

$$A_x=\frac{B}{2}y,\quad A_y=-\frac{B}{2}x,\quad A_z=0. \tag{9.2.13}$$

Hamilton 量是

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left[\left(\hat{p}_x-\frac{eB}{2c}y\right)^2+\left(\hat{p}_y+\frac{eB}{2c}x\right)^2\right], \tag{9.2.14}$$

此处完全极化的电子自旋在磁场中的能量作为一个常数就不再列入了. 以式(9.2.8)中的 a_0 作为长度单位，

$$a_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega_c}\right)^{1/2} = \left(\frac{\hbar c}{eB}\right)^{1/2}, \tag{9.2.15}$$

并用复坐标 z 及 z^* 作为独立变量取代 x 及 y：

$$z = \frac{x+\mathrm{i}y}{2a_0}, \quad z^* = \frac{x-\mathrm{i}y}{2a_0}. \tag{9.2.16}$$

从式(9.2.16)得

$$\frac{\partial}{\partial z} = a_0\left(\frac{\partial}{\partial x} - \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad \frac{\partial}{\partial z^*} = a_0\left(\frac{\partial}{\partial x} + \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial y}\right). \tag{9.2.17}$$

可以简单地从式(9.2.16)、式(9.2.17)得出以下几个关系：

$$\left.\begin{aligned} z^* z &= \frac{1}{4a_0^2}(x^2+y^2), \\ z\frac{\partial}{\partial z} - z^*\frac{\partial}{\partial z^*} &= \mathrm{i}\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right), \\ \frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial z^*} &= a_0^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right). \end{aligned}\right\} \tag{9.2.18}$$

将式(9.2.14)用 z 和 z^* 表示，有

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2}\hbar\omega_c\left[-a_0^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{4a_0^2}(x^2+y^2) - \mathrm{i}\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)\right] \\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega_c\left[-\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial z^*} + z^* z - z\frac{\partial}{\partial z} + z^*\frac{\partial}{\partial z^*}\right] \\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega_c\left[\left(z^* - \frac{\partial}{\partial z}\right)\left(z + \frac{\partial}{\partial z^*}\right) + 1\right] \end{aligned}$$

定义算符 a 和 $a^\dagger$ 为

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z + \frac{\partial}{\partial z^*}\right), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z^* - \frac{\partial}{\partial z}\right), \tag{9.2.19}$$

就得到

$$\hat{H} = \hbar\omega_c\left[a^\dagger a + \frac{1}{2}\right]. \tag{9.2.20}$$

a 和 $a^\dagger$ 满足对易关系

$$[a, a^\dagger] = 1. \tag{9.2.21}$$

在 $a^\dagger a$ 对角化的表示中，能量本征态是

$$E = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{9.2.22}$$

这正是二次量子化的谐振子问题. 由式(9.2.14)所定义的 $\hat{H}$，本是二维问题，应该还有一个自由度和相应的量子数，就像 $\hat{H}$(式(9.2.2))中的 $\hat{p}_x$ 一样. 它不进入能量本征值的表达式，但决定谐振子的平衡位置. 和式(9.2.19)相比，可类似地定义为

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z^* + \frac{\partial}{\partial z}\right), \quad b^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z - \frac{\partial}{\partial z^*}\right), \tag{9.2.23}$$

它们也满足

$$\left.\begin{aligned} &[b, b^\dagger] = 1, \\ &[b, a^\dagger] = [b, a] = 0, \\ &[b^\dagger, a^\dagger] = [b^\dagger, a] = 0. \end{aligned}\right\} \tag{9.2.24}$$

因此，$\hat{H}$的本征态也可以同时是 $b^\dagger b$ 的本征态，即有

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi_{nm} &= \hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right)\psi_{nm}, \\ b^\dagger b\psi_{nm} &= m\psi_{nm}.\end{aligned} \tag{9.2.25}$$

$\hat{H}$的本征态 ψ_{0m} 满足

$$a\psi_{0m} = 0,$$

即

$$\left(z+\frac{\partial}{\partial z^*}\right)\psi_{0m} = 0.$$

它的解可以从一个最低解 ψ_{00} 生成，此处

$$\psi_{00} = \text{const } \mathrm{e}^{-zz^*}. \tag{9.2.26}$$

将 $b^\dagger$ 作用于 ψ_{00} 上 m 次，有

$$\psi_{0m} = \text{const}(b^\dagger)^m\psi_{00} = \text{const } z^m\mathrm{e}^{-zz^*}, \quad m = 0,1,2,\cdots,M. \tag{9.2.27}$$

对最低 Landau 能级而言，m 就是角动量量子数. 将角动量算符的 z 分量

$$L_z = -\mathrm{i}\,\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \hbar\left(z\frac{\partial}{\partial z} - z^*\frac{\partial}{\partial z^*}\right), \tag{9.2.28}$$

作用在 ψ_{0m}上，并用

$$L_z z^m = \hbar m z^m, \quad L_z \mathrm{e}^{-zz^*} = 0,$$

就得到

$$L_z\psi_{0m} = \hbar m\psi_{0m},$$

证明了上面的陈述. m 的上限 M 如下可以确定. 对 $m=M$ 态求$\langle x^2+y^2\rangle$：

$$\frac{1}{4a^2}\langle x^2 + y^2\rangle = \frac{\int_0^\infty (z^*z)^M\mathrm{e}^{-2z^*z}z^*z\mathrm{d}z\mathrm{d}z^*}{\int_0^\infty (z^*z)^M\mathrm{e}^{-2z^*z}\mathrm{d}z\mathrm{d}z^*} = \frac{M+1}{2},$$

在积分中 $\mathrm{d}z\mathrm{d}z^*$ 可以用平面极坐标面积元 $2\pi r\mathrm{d}r$ 代替，$z^*z=r^2$，取积分即得结果. 若二维平面面积为 A，则有

$$A = \pi\langle x^2 + y^2\rangle = 2\pi a_0^2(M+1).$$

当 M 很大时，单位面积上态的数目 n_B 是

$$n_B = \frac{M}{A} = \frac{eB}{hc},$$

即

$$M = \frac{BA}{\Phi_0} = \frac{\Phi}{\Phi_0}, \tag{9.2.29}$$

此处 Φ 为通过平面的磁通量. 结果和式(9.2.11)相同.

从式(9.2.19)和式(9.2.23)可得

$$b^\dagger b = a^\dagger a + \frac{1}{\hbar}L_z,$$

用此关系得到

$$b^\dagger b\psi_{nm} = m\psi_{nm} = n\psi_{nm} + \frac{1}{\hbar}L_z\psi_{nm},$$

即

$$L_z\psi_{nm} = \hbar(m-n)\psi_{nm}. \tag{9.2.30}$$

ψ_{nm} 也是 L_z 的本征函数，对 Landan 能级 $n\neq 0$，角动量的本征值是 $\hbar(m-n)$. 从式(9.2.28)可得

$$[L_z,b] = -\hbar b,\quad [L_z,b^\dagger] = \hbar b^\dagger. \tag{9.2.31}$$

这个结果意味着，b 和 $b^\dagger$ 作用于 L_z 的本征态时，分别降低和升高 L_z 的本征值 $\hbar$. 由于 b 和 $b^\dagger$ 不改变量子数 n，它们所降低和升高的是量子数 m.

$\hat{H}$ 和 $b^\dagger b$ 的本征函数是

$$\begin{aligned}\psi_{nm} &= \text{const}(b^\dagger)^m(a^\dagger)^n\psi_{00}\\ &= \text{const}\left(z-\frac{\partial}{\partial z^*}\right)^m\left(z^*-\frac{\partial}{\partial z}\right)^n e^{-zz^*}.\end{aligned} \tag{9.2.32}$$

第一 Landau 能级上的各态是

$$\psi_{0m} = \text{const}\ z^m e^{-z^*z},\quad m=1,2,\cdots,M. \tag{9.2.33}$$

9.3　磁通量子化

在本书 3.1 节中讨论了磁通量子化. 在空心的超导圆柱环内通过的磁通是量子化的，是 $hc/2e$ 的整数倍. 杨振宁和 N. Byers 指出，这并非电磁场新的物理原理. 若 q 是带电粒子的电荷，则磁通量子 $\Phi_0=hc/q$ 的存在是规范不变性以及波函数单值性的结果. 在超导体中存在 Cooper 对，$q=2e$，因此实验中测出的磁通量子是 $hc/2e$. 在 3.1 节讨论的 Aharonov-Bohm 效应表明延展态电子在 $\boldsymbol{B}=0$ 的区域内可以感知磁通 Φ 的存在，但在 Φ 的值相差一个磁通量子 $\Phi_0=hc/e$ 时，干涉条纹是没有区别的. 在量子 Hall 效应的物理中，磁通量子化也是重要的.

设在 xy 平面原点处有沿 z 轴的磁通 Φ 通过. 在整个平面(除原点外)上 $\boldsymbol{B}=0$. 因此，可以选矢量势

$$\boldsymbol{A} = \nabla\chi. \tag{9.3.1}$$

上式在除原点以外的各处成立. 这样就有 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=0$，原点除外. $\boldsymbol{A}$ 应满足

$$\oint \boldsymbol{A}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} = \Phi, \tag{9.3.2}$$

此处闭合路径应包括原点在内. 为了明确地写出 χ 的形式，设路径是以 R 为半径以原点为圆心的圆，并选 χ 为仅依赖方位角的函数，这样

$$\oint \boldsymbol{A}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} = \frac{1}{R}\frac{\partial\chi}{\partial\phi}\Big|_{r=R}\cdot 2\pi R = \Phi. \tag{9.3.3}$$

因此，

$$\chi = \frac{\Phi}{2\pi}\phi.$$

此处 ϕ 是方位角. 在规范变换中

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}' &= \boldsymbol{A}+\nabla\alpha,\\ \psi\to\psi' &= \exp\left(\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\alpha\right)\psi,\end{aligned} \tag{9.3.4}$$

此处 α 是任意空间坐标的函数. 由于不涉及标量势,故 α 可以与时间无关. 若选 $\alpha=-\chi$,则有

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}' &= 0 \\ \psi' &= \exp\left(-\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}\chi\right)\psi = \exp\left(-\mathrm{i}\frac{\Phi}{\Phi_0}\phi\right)\psi. \end{aligned} \tag{9.3.5}$$

在变换中 Φ 从 $\boldsymbol{A}$ 中转到 ψ' 中了. 如果波函数是描述延展态的,坐标 ϕ 可以取任何值. 如果令 ϕ 连续变化,从 ϕ 变到 $\phi+2\pi$,则波函数的单值性要求

$$\frac{\Phi}{\Phi_0} = m, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots.$$

整数倍磁通量子可以用规范变换把它除掉,即 $m\Phi_0$ 不会改变物理,它不改变能量状态,仅在波函数前乘一个相因子.

考虑第一 Landau 能级上的状态式(9.2.33),式中 m 最大值 M 由式(9.2.29)给出. 将磁通 Φ 绝热地变化为 $\Phi\pm\Phi_0$,变化后的 M 值为 $M\pm1$. 在磁通变化过程中 Hamilton 量是时间函数 $\hat{H}(t)$. 根据绝热近似的原理①,态式(9.2.33)在演化中一直保持为 $\hat{H}(t)$ 的"瞬时定态". 在磁通变化完成后,Hamilton 量实际上与以前没有区别,因为一个磁通量子可以用规范变换除去,因此变化后的态仍是原来 $\hat{H}$ 的本征态. 原有的 ψ_{0m} 现在变为 $\psi_{0,m\pm1}$. 角动量的变化是由于磁通变化感应电动势,在方位角减小(增加)方向,它加速(减速)电子,增加(减少)角动量. 一般情况下 $m\to m\pm1$ 仍留在第一 Landau 能级内.

9.4 整数量子 Hall 效应

实现量子 Hall 效应,首先要获得"二维电子气",即电子被约束在二维平面上运动. 这能使它们的能量状态成为式(9.2.12)所示的分立的 Landau 能级. 可以用电场使电子局限在半导体表面. 这可以采用硅金属氧化物场效应管(MOSFET)或 GaAs-Al$_x$Ga$_{1-x}$As 异质结构实现[5]. 测量示意图 9.2 中端 a、b 间是纵向电压 U_L,端 a,c 间是 Hall 电压 U_H,磁场 B 垂直于平面. 电流 I 流过长 L_x,宽 L_y 的二维导体,测出 B、U_L 和 U_H. 实验是在低温(K 量级)及强磁场($\lesssim$10T)下进行的. 这时电子是完全极化的,自旋能量项是常数,可以略去. 在样品方面要求成分控制很严. 从测量中可以导出纵向电阻 $R_x=\frac{U_L}{I}$(文献中有时称为对角电阻)

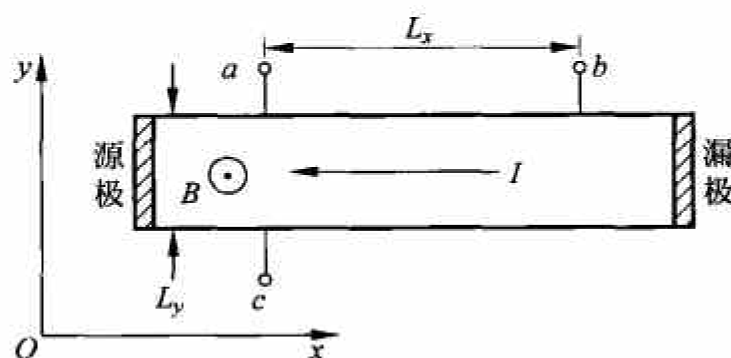


图 9.2 量子 Hall 效应测量示意图

① 请参阅本书第 3 章 3.5 节.

和 Hall 电阻 $R_H=\frac{U_H}{I}$. 图 9.3 给出它们随磁场 B 变化的关系，图中画出的 ρ_{xx} 就是纵向电阻率 ρ_x，ρ_{xy} 就是 Hall 电阻率 ρ_H. 另外对于二维情况，Hall 电阻 R_H 与 Hall 电阻率 ρ_H 相同，因为二维情况的电流密度定义是单位长度上通过的电流，即有

$$R_H=\frac{U_H}{I}=\frac{E_yL_y}{j_xL_y}=\frac{E_y}{j_x}=\rho_H. \tag{9.4.1}$$

同理，纵向电阻与纵向电阻率成正比，即 $R_x=\frac{U_x}{I}=\frac{E_xL_x}{j_xL_y}=\rho_x\frac{L_x}{L_y}$. 和经典 Hall 效应显著的差别在于：这里 ρ_H 和 B 不再呈线性关系. von Klitzing 发现，二维电子气的 Hall 电阻 R_H 与 B 的关系是在总的直线趋势上出现一系列平台(称为量子化 Hall 电阻)，它们出现在

$$R_H=\frac{h}{ie^2},\quad i=1,2,3,\cdots \tag{9.4.2}$$

对应平台的 B 值处，对角电阻 R_x 为 0. 出人意料之外的是，量子 Hall 电阻的值与具体材料无关，仅依赖于普遍常数 h 和 e. 在理想条件下能测得十分精确(误差百万分之一)，即有

$$R_H=\frac{25\,812.8}{i}\Omega. \tag{9.4.3}$$

由于 i 为整数，此效应被称为整数量子 Hall 效应. 它已经用于计量学，作为电阻标准.

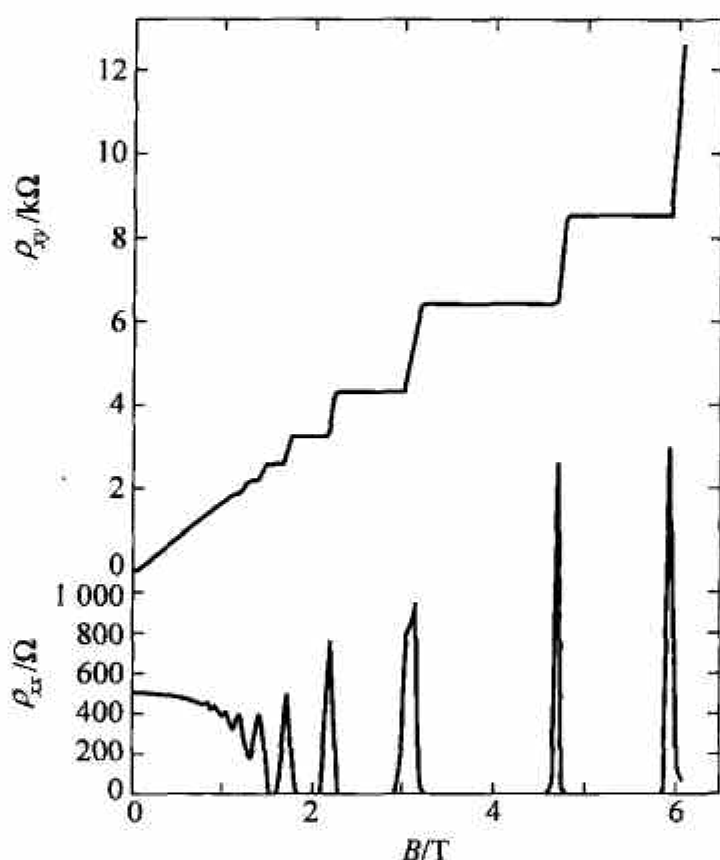


图 9.3 整数量子 Hall 效应

对整数量子 Hall 效应，可以从单电子性质出发加以理解. 从式(9.2.11)和式(9.2.12)可知，样品上 Landau 能级简并度是

$$N_B=n_BL_xL_y=\frac{e}{hc}BL_xL_y=\frac{\Phi}{hc/e}, \tag{9.4.4}$$

此处 Φ 是通过样品的磁通量，分母上的 hc/e 正是磁通量子 Φ_0，即

$$\Phi_0=\frac{hc}{e}, \tag{9.4.5}$$

故有

$$N_B = \frac{\Phi}{\Phi_0}. \tag{9.4.6}$$

这个关系的意义是，如果一个 Landau 能级被填满，则每个电子能分摊到一个磁通量子. 如有 i 个 Landau 能级刚好填满，则电子总数 $N(N=iN_B)$ 与总磁通量 Φ 的关系是 $N=i\Phi/\Phi_0$.

一个 Landau 能级刚好被填满时，电子的表面密度是

$$n_s = \frac{eB}{hc}, \tag{9.4.7}$$

而 Hall 电阻就是

$$R_H = \frac{B}{n_s ec} = \frac{h}{e^2}. \tag{9.4.8}$$

若有 i 个 Landau 能级被完全填充，则应有

$$R_H = \frac{h}{ie^2}. \tag{9.4.9}$$

至此，我们确立了量子化 Hall 电阻的值与 Landau 能级填充数的关系. 定义 Landau 能级的填充因子

$$\nu = \frac{n_s}{n_B} = \frac{n_s}{eB/hc}, \tag{9.4.10}$$

它是电子数目与一个 Landau 能级简并度之比，表明 Landau 能级被填充的程度. $\nu=i$(整数)时，就给出量子化的 Hall 电阻值. 在此处的平台反映出填充态的一种稳定性. 实验给出，在 $\nu=i$ 时横向电阻为 $h/(ie^2)$，纵向电阻为 0. 若将电阻率、电流密度、电场关系写作

$$\left.\begin{aligned} E_x &= \rho_{xx} j_x + \rho_{xy} j_y, \\ E_y &= \rho_{yx} j_x + \rho_{yy} j_y, \end{aligned}\right\} \tag{9.4.11}$$

并将 ρ 写成矩阵形式，则有

$$\boldsymbol{\rho} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{h}{ie^2} \\ -\frac{h}{ie^2} & 0 \end{bmatrix}. \tag{9.4.12}$$

这里，电流方向与电场方向垂直. 电导率 σ 是 ρ 的倒数，在矩阵形式下它是

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{ie^2}{h} \\ \frac{ie^2}{h} & 0 \end{bmatrix}. \tag{9.4.13}$$

$\nu=i$ 的量子 Hall 状态是以 $\rho_{xx}=0, \sigma_{xx}=0$ 为表征的，在 9.6 节中讨论整体相图时还会用到这些关系.

既然量子化 Hall 电阻是由能级填充决定的，那么为什么不反映固体材料的性质呢？固体内的周期势会使电子的有效质量 m^* 有所不同，但它不影响 Landau 能级的填充. 考虑样品有限大小、有限温度、电子-电子相互作用、杂质影响等，大量的理论工作导致同样的结果：只要 $\sigma_{xx}=0$，这些效应都不会给量子化的 Hall 电阻值带来修正[5]. 若干年来在凝聚态物理方面的研究还没有出现过如此“基本”的规律性.

在以上的讨论中我们没有考虑晶体的周期场. 在简单的处理中，周期场可以看作会导致

有效质量和有效介电常数.在此情况下 Landau 问题的解可以看作是 Wannier 波函数的包络函数[①].更深入的处理导致磁位移和拓扑考虑(9.4.1节).

Landau 能级的简并会被外场解除.在量子 Hall 效应中,它会被 Hall 电压解除,也会被杂质势解除. Hall 电压是 EL_y(E 是电场强度).在式(9.2.2)中应该为此加上一项静电势 $-eE_y$.这一项可以并入原点 y_0 的移动中,它现在变为

$$y_0 = -\frac{cp_x}{eB} - \frac{Emc^2}{eB^2}. \tag{9.4.14}$$

相应于 Hall 电压的附加能量是

$$\delta\epsilon = -eE\delta y = \frac{cEp_x}{B} - \frac{E^2mc^2}{B^2}, \tag{9.4.15}$$

它与 p_x 有关.和式(9.2.12)相比,在该式中 p_x 并不进入能量本征值,但现在它进入了.因为 $0 \leqslant y_0 \leqslant L_y$ 意味着 $0 \leqslant |p_x| \leqslant \frac{eBL_y}{c}$,这样 Landau 能级简并就解除了.对 p_x 依赖导致群速度 $v_g = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p_x} = \frac{eE}{B}$,它正是电子在交叉电磁场中的漂移速度[②].杂质问题在文献[5]中有系统介绍.简单地考虑杂质势

$$V_\mathrm{I} = \lambda\delta(x - x_0)\delta(y - y_0). \tag{9.4.16}$$

将 $\hat{H} + V_\mathrm{I}$ 的本征态用 $\hat{H}$ 的本征态展开,有

$$\psi_{nk}(x,y) = L^{-\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\varphi_{nk}(y - y_0), \tag{9.4.17}$$

此处我们用 k 置换了 $p_x/\hbar$.微扰论给出了能量本征值 E,它是下列方程的解:

$$1 = \lambda\sum_{n,k}\frac{|\psi_{nk}(x_0,y_0)|^2}{E - E_{nk}}. \tag{9.4.18}$$

Prange[5] 预言式(9.4.18)的每一个解都在未微扰的两个能级之间,

$$E_{nk} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{cE\,\hbar k}{B}, \tag{9.4.19}$$

除非在 $\lambda < 0$(吸引杂质势)情况下可能有一个能级位于所有未微扰能级之下.每一个 Landau 能级都有一个完全局域化的状态.在漂移速度小的情况下,它的能量远低于原来 Landau 能量 $n\hbar\omega_c$,相差大小为 λ 量级.对 $x_0 = y_0 = 0$ 最低局域化态可以近似为

$$\psi_{\mathrm{loc}} \propto \mathrm{e}^{-(x^2+y^2)/4a_0^2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}xy/2a_0^2}. \tag{9.4.20}$$

这类状态的能量从原有的 $n\hbar\omega_c$ 向上($\lambda > 0$)或向下($\lambda < 0$)推移.其他的式(9.4.18)的解 ψ_{nk} 都在未微扰能级附近,也都是延展态.每个 Landau 能级有 $N-1$ 个延展态,$N = n_BL_xL_y$. Prange 还给出延展态携带电流的表达式:

$$I = -\frac{e}{\hbar}\sum_n (E_{nk_{\max}} - E_{nk_{\min}}). \tag{9.4.21}$$

有一个巧妙的细微之处:既然杂质减少了载流的状态数目,电流就应该减小,Hall 电导也随之减小,为什么还能保持普适的值,而与杂质无关?实际情况是:通过杂质附近的电子得到加速,这部分电流的增加正好补偿由于减少载流态而减少的电流.图 9.4 给出能级的态密

---

① 见 P. Y. Yu, M. Cardona. Fundamentals of Semiconductors. Berlin: Springer 1996.

② 电子在相互垂直的 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 场中的运动在电动力学书中都有介绍.令 $\boldsymbol{B}$ 垂直于运动平面而 $\boldsymbol{E}$ 在平面内.电子运动包含回旋加速器运动,频率为 $\omega_c = eB/mc$,以及引导中心的漂移,漂移速度为 $v_d = e\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}/B^2$.

度. 每个延展态的 Landau 能级劈裂为延展态的能带，局域态则布局在延展带之间.

当一个 Landau 能带被充满时，传导电子提供 Hall 电阻 h/e^2. 设此时磁场 B 减小，根据式(9.2.11)Landau 能带所能容下的电子数减少. 由于 Pauli 不相容原理，多余的电子就应排到下一个 Landau 能带上去. 这本来会带来 Hall 电阻的连续变化，但由于在 Landau 能带之间有局域能级的存在，多余的电子首先会排在这些局域态上. 它们不参与传导过程，因此并不导致 Hall 电阻的变化，这就是平台. 磁场继续减小，直到 Fermi 能量 E_F 达到下一个 Landau 能带. 电子继续布局在 Landau 能带的延展态中，此时平台结束，Hall 电阻继续连续变化.

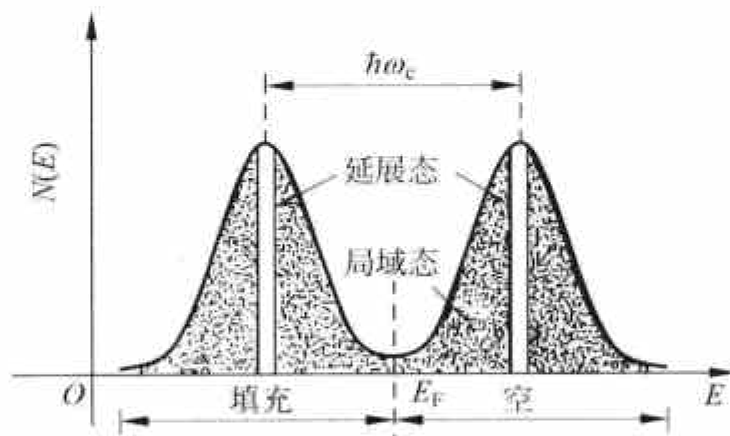


图 9.4 强磁场下二维电子气能级密度示意图

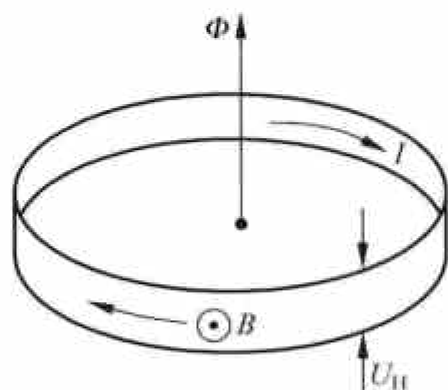


图 9.5 环形金属带模型用以证明量子化 Hall 电阻

量子化 Hall 电阻的普遍性是个富有挑战性的问题，Robert Laughlin 在 1981 年从规范不变性这个基本的物理学原理说明了这个问题[6]. 考虑一个周长为 L_x 的带状样品形成的闭合环(见图 9.5). 处处有垂直于带的磁场 B 穿过(z 轴方向)，带的上下侧(y 轴方向)有电压降 U_H，沿带(x 轴方向)有电流 I 流过，它产生通量 Φ 从环中穿过. 由于 $\rho_{xx}=0$，没有耗散，因此能量守恒. 电流、磁通与能量之间的关系是

$$I = c\frac{\partial E}{\partial \Phi}. \tag{9.4.22}$$

此式可以简单推导如下. 环上电流使环具有磁矩 $\mu=\frac{I}{c}S$，S 是环的面积. 令磁通 Φ 有一微小变化 $\delta\Phi$，相应磁场变化是 $\delta\Phi/S$，磁矩 μ 在其中的能量变化是 $\delta E=\mu\frac{\delta\Phi}{S}=\frac{I}{c}\delta\Phi$，即式(9.4.22). 电子的波函数是(参见式(9.2.3))

$$\psi(x,y) = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_x x\right)\chi(y), \tag{9.4.23}$$

它的单值性要求 $p_x=\frac{2\pi\hbar}{L_x}n$($n$ 为整数，L_x 为环周长). 各电子不同的 p_x 值与不同的 y 方向的平衡位置 y_0 相对应(见式(9.3.5)). 设磁通 Φ 变化一个磁通量子 $\Phi_0=hc/e$，从式(9.4.4)可知，磁通一个单位的变化就相当于在波函数上乘以一个相因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}$，方位角 ϕ 在图 9.5 上就是 $2\pi x/L_x$. 在波函数(式(9.4.23))引起的变化是 $p_x\to p_x+2\pi\hbar/L_x$，这相当于各电子的 p_x 值都改变 $2\pi\hbar/L_x$，即取代其前面一个电子的原有 p_x 时才有可能实现. 每个电子都向上移一步，其结果就相当于具有最小 p_x 值的电子移到具有最大 p_x 值的地位. 相应地，就相当于 y 方向平衡位置从带的一端换到另一端. 磁通变化导致 x 方向的感应电场，由于 Hall 流

体的电导只有反对角元(见式(9.4.13)),电场导致 y 方向的电荷运动.两端电势差是 U_H,因此能量变化是 eU_H.若有 i 个 Landau 能级被充满,则总能量变化是

$$\Delta E = ieU_H. \tag{9.4.24}$$

根据式(9.4.22),有

$$I = c\frac{\Delta E}{\Phi_0} = c\frac{ie}{\Phi_0}U_H = \frac{ie^2}{h}U_H, \tag{9.4.25}$$

这正好给出

$$R_H = \frac{h}{ie^2}. \tag{9.4.26}$$

由此可见 Hall 电阻的普遍性是基于规范不变性这一物理学基础原理之上的. Laughlin 认为,整数量子 Hall 效应的平台实际上是对基本电荷 e 的量度.因此,当分数量子 Hall 效应发现后不久,Laughlin 便作出了判断,在那里准粒子激发带有分数电荷.

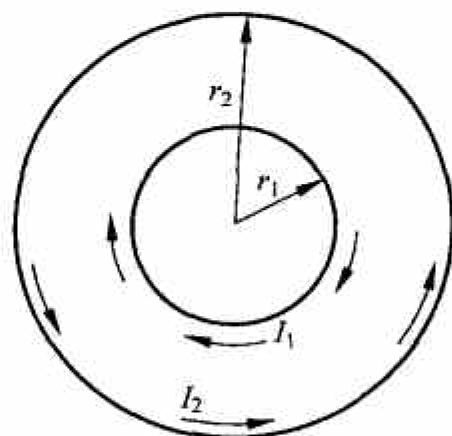


图 9.6 样品的几何

B. Halperin[7]仿照 Laughlin[6]的做法,证明了在环状薄膜样品的物理边缘存在连续的"边缘态".在图 9.6 中环状样品位于 $r_1<r<r_2$ 区域,有均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 垂直于薄膜平面,磁通 Φ 在 $r<r_1$ 区域内通过环洞.在环外边界附近的波函数 $\psi_{\nu m}$ 满足一维谐振子的 Schrödinger 方程,波函数径向的平衡位置 r_m 由下式决定:

$$B\pi r_m^2 = m\Phi_0 - \Phi, \tag{9.4.27}$$

此处 Φ_0 是磁通量子,m 是角动量量子数,ν 是径向波函数的节点数.波函数在外边缘为零实际上是个很强的要求.当 r_m 增加趋向外边缘时,能量 $E_{\nu m}$ 随 r_m 单调增加,对任何 ν 值都是如此. Halperin 并指出,外边缘和内边缘所携带的电流方向相反.这点可以从半经典的图画看出. $\boldsymbol{B}$ 垂直于纸面从内向外,因此电子的回旋加速器运动是逆时针方向的.接近外边缘时电子会和它碰撞,并被势垒反射.为了继续它的回旋加速器运动,它的引导中心就要沿边缘顺时针方向运动.因此就如图中 I_2 所示,外边缘电流是逆时针方向的.类似的分析得出沿内边缘的电流 I_1 是顺时针方向的.边缘电流因此是手征的.

Prange 指出①在式(9.2.2)可以加上只依赖 y 的势.在边缘处的势急剧增大,解就相当于边缘态.这些态具有准连续谱,他把样品内部的 Landau 能级和势阱顶部的能级连接起来,和 Halperin[7]的结果一致.

Prange 还指出,强调边缘态可能令有些人认为量子 Hall 效应必须有边缘态才能存在,或电流大部甚至全部由边缘态携带.实际上样品体内的量子 Hall 效应保证了边缘态的存在,而不是相反.对某些几何,例如环面(torus),量子 Hall 效应在没有边缘态的情况下照样存在.

在 von Klitzing 发现整数量子 Hall 效应的同时,关于 Anderson 局域化的研究也有了进展②.解释量子 Hall 效应的平台,必须考虑局域态,但根据 Anderson 局域化的概念,二维电子运动受无序的影响很大,以至于所有电子状态都是局域的.这个结论明显地和量子

① 见文献[5]第1章注8,以及习题4.

② 见 Callaway J. Quantam Theory of the Solid State. 2nd edition. Academic Press 1991.

Hall 效应的实验现象矛盾，因为 Hall 电流需要延展态电子载带. R. Prange 在理论上给出，在 *Landau* 能级处延展态必然存在，如图 9.4 所示，且 Hall 电流值并不因局域态的存在而改变①. 上述的 Halperin 工作也给出在无序存在情况下延展态必然存在的结论. Anderson 局域化理论是基于重正化群方法之上的，A. Pruisken 指出了②如果在这个方法中包括进来瞬子的非微扰效应将会改变其结论.

9.4.1 磁平移，Hall 电导的拓扑意义

Laughlin 关于整数量子 Hall 效应的诠释并未利用 Hamilton 量的具体形式就得出结论，很像是拓扑论据. D. J. Thouless[8,9]进行了一系列研究，给出 Hall 电导的拓扑意义. 考虑二维无限大体系周期势中的电子气，在垂直方向有均匀磁场存在. 在此前有不少作者研究过这个问题[10-14]. 最主要的结果是磁平移. 磁场由 Landau 规范的矢量势给出：

$$A_x = 0, \quad A_y = Bx, \tag{9.4.28a}$$

单粒子 Hamilton 量是(电子电荷是 $-e$)

$$H = \left[\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial y} - eBx\right)^2\right] + U(x,y), \tag{9.4.28b}$$

此处 $U(x,y)$ 是周期势，晶格常数为 (a,b)，

$$U(x+a,y) = U(x,y+b) = U(x,y). \tag{9.4.29}$$

在无磁场情况下，单粒子波函数由 Bloch 定理给出

$$\psi_{k_1,k_2}(x,y) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x+\mathrm{i}k_2y}u_{k_1k_2}(x,y), \tag{9.4.30}$$

此处 (k_1,k_2) 是倒格子的矢量，$u_{k_1k_2}$ 满足晶格平移对称性

$$u_{k_1k_2}(x+a,y) = u_{k_1k_2}(x,y+b) = u_{k_1k_2}(x,y). \tag{9.4.31}$$

对波函数 ψ 有

$$T_a\psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1a}\psi, \tag{9.4.32}$$

$$T_b\psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2b}\psi, \tag{9.4.33}$$

此处 $T_a = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}ap_x}$，$T_b = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}bp_y}$ 是晶格平移算符. 当磁场(矢量势)存在时，T_a 与 T_b 不再是对称操作. 应该寻找适合当前情况的新的对称操作，这就是磁平移算符. 下面根据文献[13]介绍这个概念.

采用对称规范

$$\mathrm{A}_x = -\frac{1}{2}\mathrm{B}y, \quad \mathrm{A}_y = \frac{1}{2}\mathrm{B}x.$$

在此规范下定义磁平移生成元

$$\Pi_i = p_i - \frac{e}{c}A_i - \frac{eB}{c}\varepsilon_{ij}x_j = p_i + \frac{e}{c}A_i \tag{9.4.34}$$

从此可以得到

$$\left[\Pi_i, p_j - \frac{e}{c}A_j\right] = 0.$$

由于选定的规范，这个关系对于相同的或不同的 i 与 j 都成立。因此有

$$[\boldsymbol{\Pi}, H_0] = 0, \tag{9.4.35}$$

---

① 见文献[5]第 1 章.

② 见文献[5]第 5 章.

此处

$$H_0 = \frac{1}{2m}\left(-i\,\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2.$$

磁平移算符是

$$\mathcal{T}_a = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}a\Pi_x\right), \tag{9.4.36}$$

$$\mathcal{T}_b = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}b\Pi_y\right).$$

注意$\boldsymbol{\Pi}$的分量间不对易：

$$[\Pi_i, \Pi_j] = -i\,\hbar\frac{e}{c}\epsilon_{ij}\partial_i A_j = -i\,\hbar\frac{cB}{c}\epsilon_{ij} \tag{9.4.37}$$

平移算符$\mathcal{T}_a$和$\mathcal{T}_b$也不对易：

$$\mathcal{T}_a\mathcal{T}_b = \exp\left(-\mathrm{i}2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)T_bT_a, \tag{9.4.38}$$

此处 Φ 是通过面积 ab 的磁通. 当 Φ 为磁通量子 Φ_0 的整数倍时，$\mathcal{T}_a$和$\mathcal{T}_b$对易. 磁平移算符具有与单粒子 Hamilton 量对易的重要性质：

$$H = \frac{1}{2m}\left[\left(-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c}A_x\right)^2 + \left(-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c}A_y\right)^2\right] + U(x,y), \tag{9.4.39}$$

$$[\mathcal{T}_a, H] = [\mathcal{T}_b, H] = 0. \tag{9.4.40}$$

矢量势如何与周期场的晶格平移不变性相恰和呢？答案是把规范变换包括进来. 在整个空间中矢量势的变化可以被它在一个元胞中的变化所取代，以便周期条件得到满足. 我们将在此后回到这个问题. 下面用具体的矢量势

$$A_x = 0, \quad A_y = Bx. \tag{9.4.41}$$

磁平移算符生成元就是

$$\Pi_x = -\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial x},$$

$$\Pi_y = -\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial y} + \frac{e}{c}Bx.$$

定义互为质数的整数 p 和 q：

$$\Phi = \frac{cB}{hc}ab = \frac{p}{q}, \tag{9.4.42}$$

我们看到虽然$\mathcal{T}_a$和$\mathcal{T}_b$不对易，但有

$$[(\mathcal{T}_a)^q, \mathcal{T}_b] = 0, \tag{9.4.43}$$

即等价地得到了一个更大的元胞(qa, b)，可以同时将 H，$(\mathcal{T}_a)^q$ 和$\mathcal{T}_b$对角化. 和磁平移不变性相对应，我们看到 Bloch 条件也可以推广. 替代式(9.4.31)，现在有

$$u_{k_1k_2}(x+qa, y)\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}py/b} = u_{k_1k_2}(x, y+b) = u_{k_1k_2}(x,y), \tag{9.4.44}$$

而替代式(9.4.32)有

$$\mathcal{T}_a^q\psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1qa}\psi,$$

$$\mathcal{T}_b\psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2b}\psi. \tag{9.4.45}$$

从周期边界条件可以看到磁 Brillouin 区是

$$0 \leqslant k_1 \leqslant \frac{2\pi}{qa},$$

$$0 \leqslant k_2 \leqslant \frac{2\pi}{b}. \tag{9.4.46}$$

$u_{k_1k_2}(x,y)$是依赖 k 的下列 Hamilton 量的本征函数：

$$H'(k_1,k_2) = \frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial x} + \hbar k_1\right)^2 + \frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\,\hbar\frac{\partial}{\partial y} + \hbar k_2 - eBx\right)^2 + U(x,y). \tag{9.4.47}$$

在下面我们给出 Thouless 等人[9,10]的结果，略去详细推导. 这两篇文献在计算 Hall 电导 $\langle I_y\rangle/V_H$ 时利用 Kubo 公式. 它在本质上是速度-速度关联. 速度算符 $\frac{1}{m}\left(p_x+\frac{e}{c}A_x\right)$ 和 $\frac{1}{m}\left(p_y+\frac{e}{c}A_y\right)$ 可以从式(9.4.47)分别取微商 $\frac{\partial H'}{\partial k_1}$ 和 $\frac{\partial H'}{\partial k_2}$ 得到. 结果是

$$\sigma_{xy} = \frac{\mathrm{i}e^2}{2\pi\,\hbar}\int\left[\left\langle\frac{\partial u_\alpha}{\partial k_1}\middle|\frac{\partial u_\alpha}{\partial k_2}\right\rangle - \left\langle\frac{\partial u_\alpha}{\partial k_2}\middle|\frac{\partial u_\alpha}{\partial k_1}\right\rangle\right]\mathrm{d}k_1\,\mathrm{d}k_2, \tag{9.4.48}$$

$$= \frac{e^2}{2\pi\hbar}\oint\left\langle u_\alpha\middle|\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}}\middle|u_\alpha\right\rangle\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{k} \tag{9.4.49}$$

此处 α 代表(k_1,k_2)，回路积分环绕磁 Brillouin 区边缘. 它代表环绕一周后相位的变化. 由于波函数的单值性，它只能是 2π 的整数倍，即 $\sigma_{xy}=ne^2/h$. 作为拓扑不变量，它必须和周期势的特定结构无关. 为了更清楚地理解周期性条件如何导致拓扑，我们从尺度为(L_x,L_y)的样品开始①. 无磁场时周期性条件是

$$\psi(L_x,y) = \psi(0,y), \quad \psi(x,L_y) = \psi(x,0)$$

有了矢量势 $A_x=0, A_y=Bx$ 就要进行规范变换. 将样品 x 方向的两端黏合在一起，就得到如图 9.5 一样的闭合的带，再将两个开放的 y 边界黏合在一起，最后形成一个环面. 当粒子从矩形的右边界移出时，它就从左边界再进入. 坐标的差别相当于一个相因子

$$\psi(L_x,y) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{eB}{\hbar c}L_x y}\psi(0,y), \quad \psi(x,L_y) = \psi(x,0). \tag{9.4.50}$$

依赖于 y 的相因子将 A_y 在右边界的值重新置回它在左边界的值. 但这里要有一个自恰条件. 从 $\psi(0,0)$ 到 $\psi(L_x,L_y)$ 有两种办法. 用第一式从 $\psi(0,0)$ 到 $\psi(L_x,0)$，再用第二式从 $\psi(L_x,0)$ 到 $\psi(L_x,L_y)$；或者颠倒次序完成 $\psi(0,0)\to\psi(0,L_y)\to\psi(L_x,L_y)$. 这两种办法会给出不同结果，除非

$$\exp\left(\mathrm{i}\,\frac{eB}{\hbar c}L_xL_y\right) = 1,$$

即

$$\Phi = BL_xL_y = \frac{hc}{e}N = N\Phi_0.$$

实际上从讨论矩形样品一开始，要求矢量势满足周期边界条件，就等价于把矩形黏合成环面. 一旦环面出现，拓扑就是必然的了. 拓扑不变量定义了从 Brillouin 区(环面)映射到波函数 $u_\alpha(x,y)$的复投影空间的第一陈类(first Chern class). 用纤维丛语言，Hall 电导是基态波函数在环面底流形上的 $U(1)$丛的第一陈类. 底流形是 Brillouin 区，纤维就是单粒子 Bloch 波.

记环面上的波函数为 $u(\phi,\theta)$. 环面上的局域曲率 $K(\theta,\phi)$定义为沿环面上封闭回路绕

① 参阅文献[15]p. 9.

行一圈平行输运的失匹配与回路所围的面积之比. Gauss-Bonnet-Chern 定理给出

$$\frac{1}{2\pi}\int_{\text{torus}} K\mathrm{d}S = \text{Chern number(陈数)}.$$

考虑环面上的一个封闭回路,计算绕行一周的平行输运失匹配. 根据曲率的定义,它就等于在回路围成的表面上的面积分 $\int K\mathrm{d}S$. 但在环面上一个封闭回路所围成的表面可以是"里面"的,也可以是"外面"的. 令回路不断缩小而趋于零,里面和外面表面上面积分之差就等于 $\int_{\text{torus}} K\mathrm{d}S$, 根据 Gauss-Bonnet-Chern 定理它就是 2π 乘以陈数. 假设 Hamilton 量有微小的变化,波函数和曲率相应有微小变化. 但作为整数,陈数不能连续变化. 因此整数量子 Hall 效应的平台是与拓扑有关的. 在平台之间,由于 Hamilton 量的大变化导致能级交叉,在此处曲率发散,陈数没有定义. 这个情况使得 Hall 电导在平台间连续变化.

9.5　分数量子 Hall 效应, Laughlin 波函数

当二维电子气处在更强的磁场和更低温度(例如 20T 和 0.1K)并在最纯净的样品中,新的规律又出现了[3]. 崔琦、Störmer 和 Gossard 发现,在分数填充数 $\nu=1/3,2/3,2/5,3/5,\cdots$ 数值时,也出现了量子化的 Hall 电阻平台(见图 9.7). 图的上部画出 Hall 电阻 ρ_{xy}, 它的单位是 h/e^2. 这是为了显示出它的量子化性质,即在 $h/(ie^2)$ 处(i=整数是整数量子 Hall 效应, $i=1/3,2/3,2/5,3/5,\cdots$ 是分数量子 Hall 效应)出现量子化的平台. 为了表示出 ρ_{xy} 的数值,

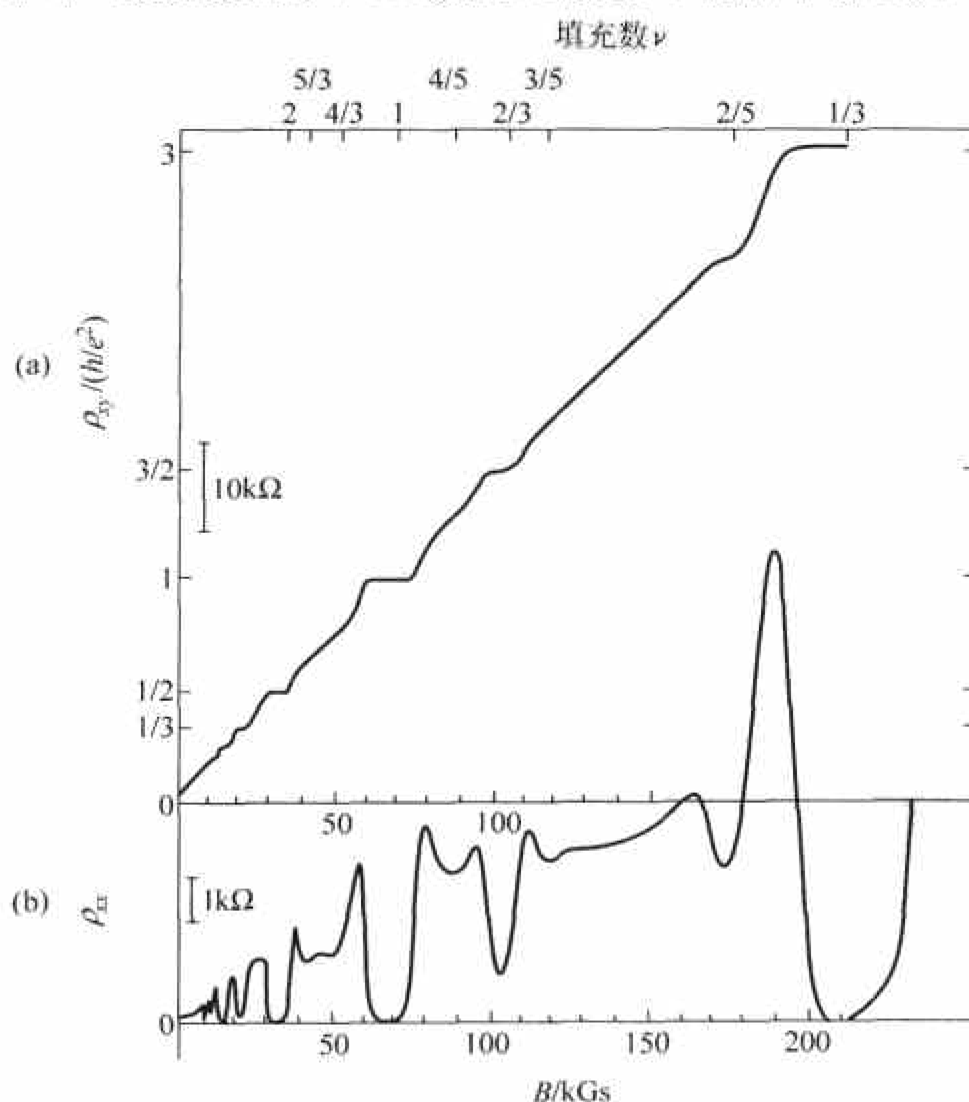


图 9.7　分数量子 Hall 效应

在这部分图上标出了 10kΩ 的大小. 图的下部是纵向电阻 ρ_{xx},由于它没有量子化的问题,就以 Ω 为单位,图上给出 1kΩ 的大小. 对应 ρ_{xy} 的量子化平台有 ρ_{xx} 的极小值出现. 如何理解分数量子 Hall 效应曾是个难题. 对整数量子 Hall 效应,填充数为整数的状态是稳定的,因为再加一个电子就需要把它放在下一个 Landau 能级,需要超越一个能隙 $\hbar\omega_c$. 现在并没有填满 Landau 能级,例如 $\nu=\frac{1}{3}$ 表示第一个 Landau 能级只填了 1/3. 是什么原因使这个填充状态稳定呢? 整数量子 Hall 效应是基于单电子图画基础上的,和多电子原子结构的考虑类似. Laughlin 意识到分数填充数状态是一个多粒子集体的凝聚体,电子-电子间的相互作用十分重要,它们导致强的关联. Laughlin 从包含电子-电子相互作用的多电子 Hamilton 量出发,借助于液氦理论中的模型波函数,猜测、试验究竟如何能得到描述这种体系的波函数. 对于填充数 $\nu=1/m$(m 为奇数),他得到[16]

$$\psi_m(z_1,\cdots,z_n)=\prod_{j<k}^{n}(z_j-z_k)^m\exp\left\{-\frac{1}{4}\sum_{l=1}^{n}|z_l|^2\right\}.$$

此处 $z_i=x_i+\mathrm{i}y_i$ 代表第 i 个电子的坐标 (x_i,y_i). 指数函数是谐振子基态波函数,而 $(z_j-z_k)^m$ 代表了电子 j 与 k 间的强关联,同时又给出了波函数对 z_j 与 z_k 交换的反对称性(注意 m 是奇数). 反对称性是 Pauli 不相容原理的要求. 这个因子使两个电子互相躲避: 当任一对 $z_j=z_k$ 时波函数为 0. 在写出这个波函数之前 Laughlin 作了许多论证工作,在文献[5]第 16 章中有描述,下面作简单介绍.

多体系统的 Hamilton 量是

$$H=\sum_j\left\{\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+V(z_j)\right\}+\sum_{j<k}\frac{e^2}{|z_j-z_k|},\tag{9.5.1}$$

此处 $V(z_j)$ 是均匀正离子(表面电荷密度为 σ)产生的势:

$$V(z)=-\sigma e^2\int\frac{\mathrm{d}^2z'}{|z-z'|},\tag{9.5.2}$$

矢量势 $\boldsymbol{A}$ 仍是

$$\boldsymbol{A}=\frac{B}{2}(y\hat{\boldsymbol{x}}-x\hat{\boldsymbol{y}}).\tag{9.5.3}$$

Laughlin 的努力并非要从多体 Hamilton 量(式(9.5.1))直接"推导出"$\nu=1/m$ 的基态波函数. 和整数量子 Hall 效应很不相同,分数量子 Hall 效应是许多电子集体效应的后果. 在写下填充因子 $\nu=1/m$ 多电子波函数以前,先从研究少数电子的量子化运动开始,从此得到向多电子情况推广所需的物理直观概念.

9.5.1 少数电子的量子化运动

从二电子问题开始. 假设电子间的库伦势能比回旋加速器能量 $\hbar\omega_c$ 小得很多. 这就可以要求二体波函数仅由单粒子最低 Landau 能级波函数组成

$$|m\rangle=\frac{1}{(2^{m+1}\pi n!)^{1/2}}z^m\exp\left(-\frac{1}{4}|z|^2\right),$$

此处长度单位是磁场度 $a_0=(\hbar c/eB)^{1/2}$, $z_i=x_i+\mathrm{i}y_i$ 是电子 i 的复坐标①. 因为 Hamilton 量

① z_i 的定义和 9.2 节相比差一个因子 2.

是轴向对称的，状态应该是相对角动量的本征状态. 波函数应该在交换 z_1 和 z_2 时反对称. 波函数的形式是

$$\psi_k = (z_1 - z_2)^{2k+1} e^{-\frac{1}{4}(|z_1|^2+|z_2|^2)}. \tag{9.5.4}$$

为了满足 Pauli 不相容原理，因子 $(z_1 - z_2)$ 的幂次应该是奇数. 电子的相对角动量应是 $2k+1$. 为了验证一下这个波函数是不是好的近似，将 $k=0$ 及 $\hbar\omega_c = e^2/a_0$（相当于磁场强度 6T）条件下的波函数和精确波函数进行比较，结果示于图 9.8. GeAs 实验用的磁场是 15T，符合的程度应该更好.

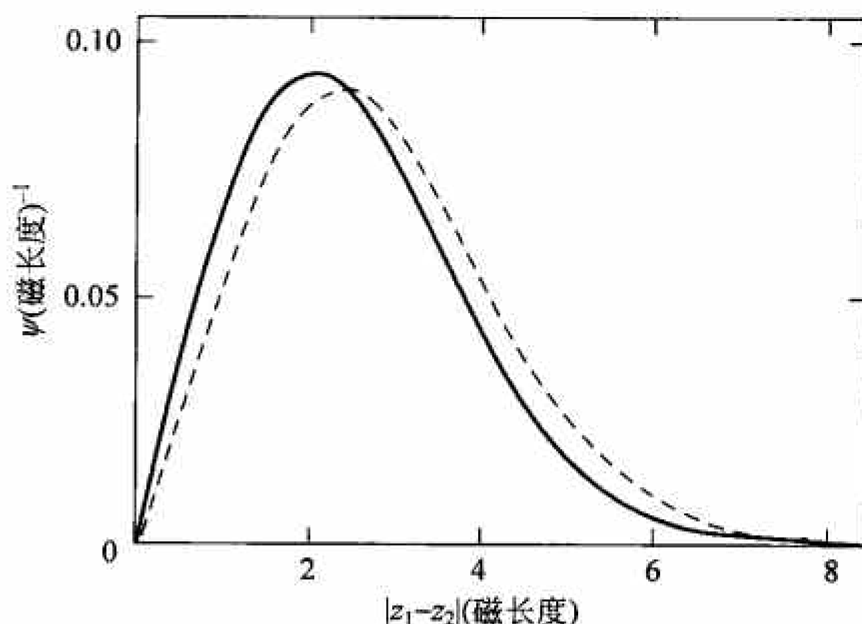


图 9.8 近似波函数（实线）与精确波函数（虚线）的比较. 取自[4]

考虑三电子问题. 从这个问题 Laughlin 引出了他解决问题想法. Hamilton 量是

$$H = \frac{1}{2m}\sum_{j=1}^{3}\left[-\mathrm{i}\,\hbar\nabla_j + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}_j\right]^2 + \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_{23}} + \frac{e^2}{r_{31}}. \tag{9.5.5}$$

定义体系的质心和相对坐标

$$\begin{aligned} \bar{z} &= \frac{z_1 + z_2 + z_3}{3}, \\ z_a &= \sqrt{\frac{2}{3}}\left[\frac{z_1 + z_2}{2} - z_3\right], \\ z_b &= \frac{1}{\sqrt{2}}(z_1 - z_2). \end{aligned} \tag{9.5.6}$$

将质心自由度去除，内部运动的 Hamilton 量是

$$\begin{aligned} H_0 = &\frac{1}{2m}\left[-\mathrm{i}\,\hbar\nabla_a + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}_a\right]^2 + \frac{1}{2m}\left[-\mathrm{i}\,\hbar\nabla_b + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}_b\right]^2 \\ &+ \frac{e^2}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{|z_b|} + \frac{1}{\left|\frac{1}{2}z_b + \frac{\sqrt{3}}{2}z_a\right|} + \frac{1}{\left|\frac{1}{2}z_b - \frac{\sqrt{3}}{2}z_a\right|}\right). \end{aligned} \tag{9.5.7}$$

Pauli 原理要求波函数对任何一对电子交换都是反对称的. 交换 $z_1 \leftrightarrow z_2$ 导致

$$\begin{aligned} &z_b \to -z_b, \\ &z_a \pm \mathrm{i}z_b \to z_a \mp \mathrm{i}z_b. \end{aligned} \tag{9.5.8}$$

式(9.5.6)的逆变换是

$$z_3 = \bar{z} - \sqrt{\frac{2}{3}}z_a,$$

$$z_1 = \bar{z} + \sqrt{\frac{1}{6}} z_a + \frac{1}{\sqrt{2}} z_b,$$

$$z_2 = \bar{z} + \sqrt{\frac{1}{6}} z_a - \frac{1}{\sqrt{2}} z_b.$$

因此对 $z_1 \leftrightarrow z_3$ 有

$$z_a \rightarrow -\frac{1}{2} z_a - \frac{\sqrt{3}}{2} z_b,$$

$$z_b \rightarrow -\frac{\sqrt{3}}{2} z_a + \frac{1}{2} z_b.$$

$$z_a + \mathrm{i} z_b \rightarrow \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{2\pi}{3}} (z_a - \mathrm{i} z_b),$$

$$z_a - \mathrm{i} z_b \rightarrow \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{2\pi}{3}} (z_a + \mathrm{i} z_b) \tag{9.5.9}$$

对 $z_2 \leftrightarrow z_3$ 有

$$z_a \rightarrow -\frac{1}{2} z_a + \frac{\sqrt{3}}{2} z_b,$$

$$z_b \rightarrow \frac{\sqrt{3}}{2} z_a + \frac{1}{2} z_b.$$

$$z_a + \mathrm{i} z_b \rightarrow \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{2\pi}{3}} (z_a - \mathrm{i} z_b),$$

$$z_a - \mathrm{i} z_b \rightarrow \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{2\pi}{3}} (z_a + \mathrm{i} z_b) \tag{9.5.10}$$

我们还看到 $z_a^2 + z_b^2$ 对于任何交换都是不变的.如果波函数对 z_b 是奇幂次的,并对在 ab 平面转动 $\pm 2\pi/3$ 是对称的,就能满足 Pauli 不相容原理.在式(9.5.9)和式(9.5.10)中转动已经是明显的了.为了得到波函数的具体形式,Laughlin 要求它必须从最低 Landau 能级的单粒子波函数构成,满足 Pauli 原理,并且是角动量算符的本征态.Laughlin 选择了下面的正交归一基函数:

$$| m,n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^{6m+4n+1}(3m+n)!n!\pi^2}} \left[\frac{(z_a + \mathrm{i} z_b)^{3m} - (z_a - \mathrm{i} z_b)^{3m}}{2\mathrm{i}} \right] \cdot [z_a^2 + z_b^2]^n \mathrm{e}^{-\frac{1}{4}(|z_a|^2 + |z_b|^2)} \tag{9.5.11}$$

这些波函数张成最低 Landau 能级,满足 Pauli 原理,是角动量算符的本征函数,本征值是 $M=2n+3m$.问题是:这些波函数作为能量本征函数究竟有多好?两个态 $|m=3,n=0\rangle$ 和 $|m=1,n=3\rangle$ 具有相同的角动量 $M=9$.它们的 H_0 的期望值分别是 $0.722e^2/a_0$ 和 $0.867e^2/a_0$.这两个态要混合,它们的非对角矩阵元是

$$|\langle 3,0 \mid H_0 \mid 1,3 \rangle| = 0.0277 \frac{e^2}{a_0},$$

比对角元要小得多.两个能量本征态的精确本征值是 $0.717e^2/a_0$ 和 $0.872e^2/a_0$.这两个数值也可以通过将能量矩阵对角化得来.

可以这样继续下去考虑越来越多的电子吗?显然这不是正确的路.要从三个电子的情况尽可能抽出有用的概念.Laughlin 注意到的是三电子状态 $|m,0\rangle$ 非同寻常的稳定性.这正是 $\nu=1/3$ 分数量子 Hall 效应所需要的.要研究稳定性,Laughlin 加上了一个势

$$\begin{aligned} V &= \frac{\alpha}{2}(|z_1|^2 + |z_2|^2 + |z_3|^2) \\ &= \frac{3\alpha}{2}|\bar{z}|^2 + \frac{\alpha}{2}(|z_a|^2 + |z_b|^2) \end{aligned} \tag{9.5.12}$$

它相当于作用在三个电子团簇上的压力，来考验系统的稳定性. 上面的函数形式是为了方便选择的，并非有绝对的必要性. 我们有

$$\langle m,n \mid \frac{\alpha}{2}(\mid z_a \mid^2 + \mid z_b \mid^2) \mid m',n' \rangle = \delta_{mm'}\delta_{nn'}(M+2)\alpha. \tag{9.5.13}$$

三电子团的最低能量态的 M 与 $1/\alpha$ 的关系绘于图 9.9(a). 用式(9.5.13)可以计算出在外在压力下具有角动量 M 的三电子团簇的总能量：

$$E_{\text{tot}}(M) = E_M + (M+2)\alpha.$$

考虑一个小一些的 M'，

$$E_{\text{tot}}(M') = E_{M'} + (M'+2)\alpha.$$

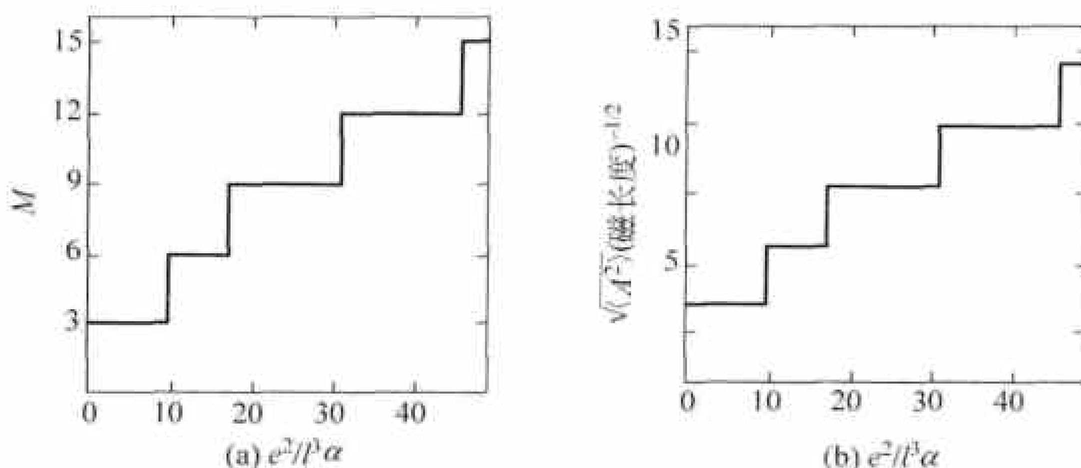


图 9.9　三电子团簇在外来压力下的总角动量(a)和均方根面积(b)，作为压力参数 α 的函数. 取自[4]

在态 M 中电子相距较远，内能较小，但第二项的斜度较大. 当在态 M 中增加 α 时，压力能增加较快. 在达到一点 $E_{\text{tot}}(M)=E_{\text{tot}}(M')$ 以后，再增加 α 就发现团簇位于 M' 了. 这解释了图中的阶跃行为. 重要之点是：在一定的 $1/\alpha$ 值范围内，M 的值在 3 的倍数上稳定着，直到达到 $1/\alpha$ 的一些特定值时，M 发生跃变. 这意味着只有 $|m,0\rangle$ 态才是稳定的. 外加的压力只能把一个 $|m,0\rangle$ 态变成另一个具有不同 m 值的 $|m,0\rangle$ 态. 具有 $n\neq 0$ 的 $|m,n\rangle$ 态根本没有机会参与. 对于任何 α 值，最低能量态永远是 $n=0$ 态. 图 9.9(b)给出三电子团簇所占面积和压力参数的关系. 面积算符是

$$A = \frac{1}{2}\text{Im}\left[\left(\frac{z_1+z_2}{2} - z_3\right)(z_1 - z_2)^*\right]$$
$$= \frac{\sqrt{3}}{4\text{i}}(z_a z_b^* - z_b z_a^*), \tag{9.5.14}$$

它的期望值是

$$\langle m,n \mid A^2 \mid m',n' \rangle$$
$$= \delta_{mm'}\delta_{nn'}\frac{3}{4}[(3m)^2 + (M+2)]. \tag{9.5.15}$$

同样的阶跃行为出现. 图 9.10 给出在电子 3 位于×处、质心位于△处条件下找到电子 1 或 2 的几率

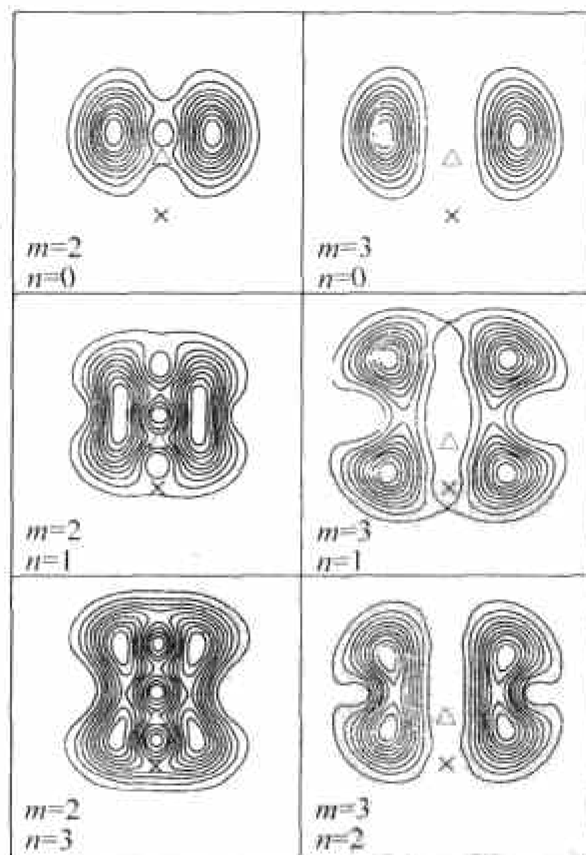


图 9.10　在质心和一个电子分别固定在标有△和×位置情况下几个状态 $|m,n\rangle$ 的电荷密度. 取自[4]

分布. 具有 $n=0$ 的态有最紧致的结构. 三个电子彼此"避免"如同晶体结构一般. 这些态是在外来压力之下最为稳定的.

9.5.2 $\nu=1/m$ 态 Laughlin 波函数

从上面的讨论可以看到 $|m,0\rangle$ 的独特特征就是将电子密度几率从 $r_{ij}=0$ 的区域排除出去. 好的近似波函数应该有很深的节点. 液体 ^{3}He 的近似波函数用一个 Slater 行列式乘以因子 $\prod_{j<k}^{N} f(z_j-z_k)$，当宗量趋于零时函数 f 也趋于零. Slater 行列式的作用是减小体系的动能. 因为强磁场在这里已经起了这个作用，就不需要 Slater 行列式了. 因此波函数就可以写作反对称函数 f 的 Jastrow 乘积形式①：

$$\psi(z_1,z_2,\cdots,z_N)=\prod_{j<k}^{N} f(z_j-z_k)\exp\left(-\frac{1}{4}\sum_{l}^{N}|z_l|^2\right). \tag{9.5.16}$$

可以用有力的论据使得 Jastrow 乘积的形式最后确定下来. 加上的约束和三电子问题的相同：

(1) 多体波函数仅由最低 Landau 能级单粒子波函数构成. 这要求 $f(z)$ 必须是解析的②.

(2) 波函数是完全反对称的，即 $f(z)$ 是奇函数.

(3) 波函数是总角动量的本征函数. 这意味着 $\prod_{j<k}^{N} f(z_i-z_k)$ 必须是粒子坐标 $z_1,z_2,\cdots,z_N$ 的 M 阶多项式，

$$M=\frac{N(N-1)}{2}m, \tag{9.5.17}$$

此处 M 是总角动量. 状态 $|m\rangle$ 的混合是不允许的. 满足上述各要求的唯一的函数是 $f(z)=z^m$，而 m 是奇数. 这样波函数就完全确定为 Jastrow 形式：

$$|m\rangle\equiv\psi_m(z_1,z_2,\cdots,z_N)=\prod_{j<k}^{N}(z_j-z_k)^m\exp\left(-\frac{1}{4}\sum_{l}^{N}|z_l|^2\right). \tag{9.5.18}$$

为了验证波函数的形式，Laughlin 计算了三个电子的近似波函数与精确波函数的重叠度. 取了三种相互作用，$1/r,-\ln r,e^{-r^2/2}$，m 取值从 1 到 13. 重叠度都是近于 1 的. 参数 m 的物理意义可以从波函数的适当诠释得到. 波函数模的平方可以诠释为一种经典几率分布函数

$$|\psi_m(z_1,z_2,\cdots,z_N)|^2=e^{-\beta\Phi(z_1,z_2,\cdots,z_N)}, \tag{9.5.19}$$

此处 Φ 是经典势能，$1/\beta$ 是假想的温度. 式(9.5.19)左方是

---

① 在液体 He 理论中波函数的 Jastrow 形式是用来描述原子之间的关联的. 引入指数函数不会损失一般性，因为它能够被因子化为 $|z_i-z_k|^2$ 的指数和另一个质心坐标的指数.

② Girvin 和 Jach[23] 证明，Hamilton 量

$$H=-\frac{2}{m}\nabla_z\nabla_{\bar{z}}+\frac{1}{2}\omega_c$$

的最低 Landau 能级的空间和全纯函数空间相同. 实际上 $\nabla_{\bar{z}}\psi(z,\bar{z})=0$ 推断出 $H\psi=\frac{1}{2}\omega_c\psi$，前一式是 Cauchy-Riemann 方程. 以上各方程的解是

$$\psi(z,\bar{z})=f(z)\exp\left(-\frac{eB}{4}|z|^2\right).$$

$$\prod_{j<k} | z_j - z_k |^{2m} e^{-\frac{1}{2}\sum |z_l|^2} = e^{2m\sum_{j<k}\ln|z_j - z_k| - \frac{1}{2}\sum |z_l|^2}.$$

令 $\beta = 1/m$，就得出

$$\Phi(z_1, z_2, \cdots, z_N) = -2m^2 \sum_{j<k} \ln | z_j - z_k | + \frac{m}{2} \sum_{l}^{N} | z_l |^2. \tag{9.5.20}$$

这是二维单组分等离子体的势能：电荷为 m 的粒子通过对数势（这是二维的 Coulomb 相互作用）相互排斥，它们也被电荷密度为 $\sigma_n = 1/2\pi a_0^2$ 的均匀中和背景电荷所吸引. 在等离子体中的电中性要求状态 $|m\rangle$ 的单粒子几率密度是

$$\rho(z_1) = \frac{N\int | \psi_m(z_1, z_2, \cdots, z_N) |^2 d^2 z_2 \cdots d^2 z_N}{\langle m \mid m \rangle}, \tag{9.5.21}$$

它必须等于等价等离子体"电荷"密度的 $1/m$，即

$$\rho_m = \frac{1}{2\pi m a_0^2}.$$

回顾一下式(9.4.7)给出的满 Landau 能级的表面电荷密度是 $1/2\pi a_0^2$，就知道 m^{-1} 正是 Landau 能级的填充因子：

$$\nu = \frac{1}{m}.$$

等离子体模拟在物理上是有趣的，我们将在 9.5.3 节讨论准粒子激发时再用到它. 要想确定 m 还有一个简单的办法. 选择一个坐标 z_1，连乘积 $\prod_{j<k}^{N} (z_j - z_k)^m$ 给出 z_1 的最高幂次为 $m(N-1)$. 和 Landau 能级波函数 $|m\rangle$ 相比，m 的最大值为 $M = \Phi/\Phi_0 = n_B A$，当 N 值大时有

$$mN = M = n_B A,$$

即

$$m = \frac{n_B}{N/A} = \frac{1}{\nu}.$$

分数量子 Hall 态是由不可压缩量子流体所表征的. 这和单组分等离子体模拟相恰合吗？实际上电中性要求只保证在平均粒子间距之外的均匀性. 对于更小的距离尺度（例如 a_0 的几倍）我们先要搞清楚等离子体是否真是液体. 电荷 Q 和温度 $1/\beta$ 等离子体的无量纲特征参数是 $\Gamma = 2\beta Q^2$. 对于当前情况，$\beta = 1/m$，$Q = m$，因此 $\Gamma = 2m$. 广泛的 Monte Carlo 二维等离子体研究表明，对于 $\Gamma \geq 140$ 等离子体是固体，否则它是液体. 对于分数量子 Hall 态 $\nu = 1, 1/3, 1/5, \cdots$，$\Gamma = 2, 6, 10, \cdots$，等价的等离子体无疑是液体.

对其他的近似波函数也进行了验证. 一般来说，由于相互排斥电子趋向于彼此远离，保持一定的距离. 图 9.10 给出大致的概念. 那么分数量子 Hall 态是 Wigner 晶体吗？看来几乎可以断定，它不是，因为有 Hall 电流存在. 图 9.11 给出 $m = 1, 3, 5$ 态的径向分布

$$g(| z_1 - z_2 |) = \frac{N(N-1)}{\rho_m^2 \langle m \mid m \rangle} \int | \psi_m(z_1, z_2, \cdots, z_N) |^2 d^2 z_3 \cdots d^2 z_N \tag{9.5.22}$$

它们表现出液体行为：在原点处有大小约为 a_0 的洞，在此区域外面迅速愈合并收敛到 1. 在图 9.12 中给出波函数 ψ_m 与同密度的 Hartree-Fock Wigner 晶体波函数的比较. 在小的 x 值处的比较看出，ψ_m 要比 Wigner 晶体波函数在能量上要有利得多[16].

Laughlin 波函数是从物理论据出发"写"出来的. 但它比想象中的要精确得多. 对于 Coulomb 相互作用，它是很好的近似，而对于一类短力程的排斥赝势（pseudo potential）

而言，它是精确的基态[17,18].

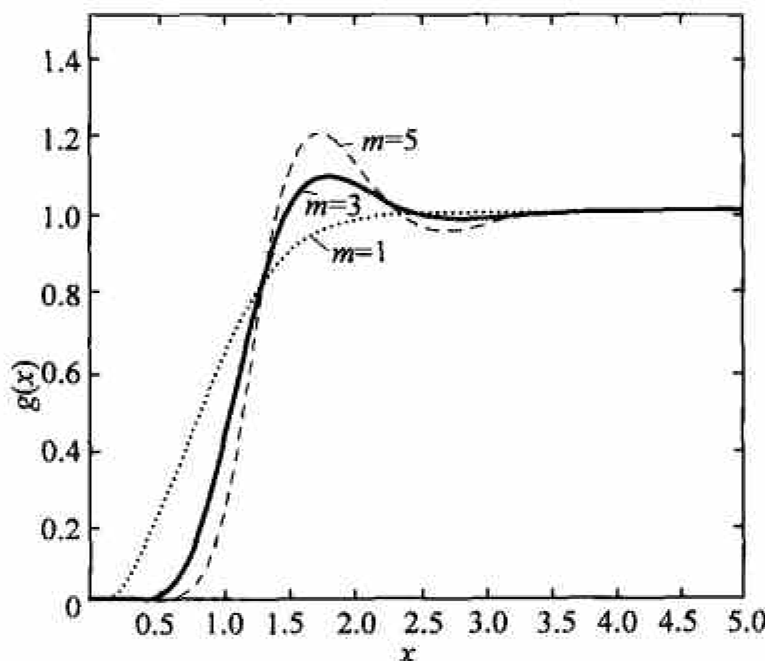


图 9.11 作为约化变量 $x=|z_1-z_2|/\sqrt{2m}$ 函数的 ψ_m 的径向分布函数. 取自[4]

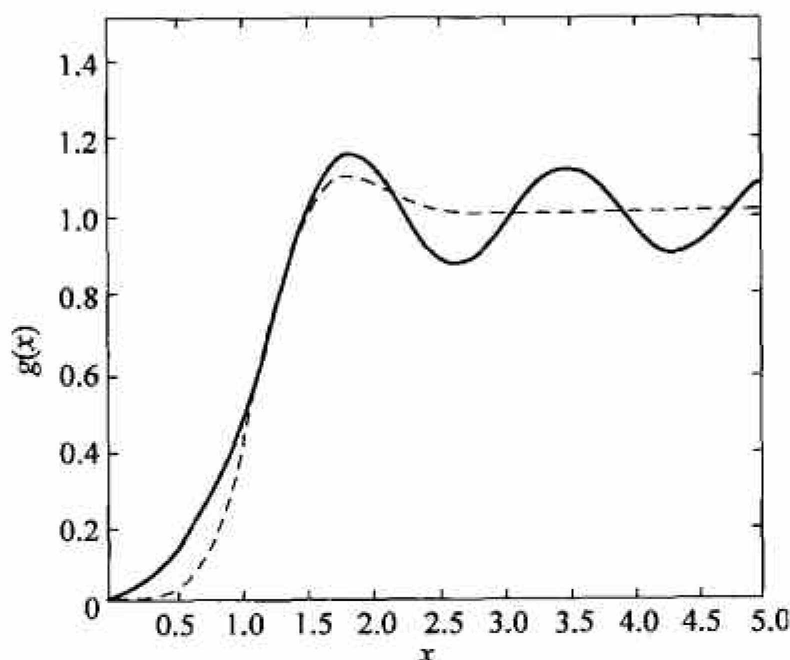


图 9.12 ψ_m 的径向分布函数（虚线）和同密度的 Wigner 晶体波函数径向分布（实线）的比较，作为变量 x 的函数. 取自[4]

9.5.3 准粒子激发

考虑一个非常细的螺线管带有一个磁通量子，被绝热地引进系统，在 $z=0$ 处刺穿样品平面. 在通量变化过程中 Laughlin 波函数会怎样变化？将 ψ_m 中的 $(z_i-z_k)^m$ 因子展开，得到

$$\psi_m(z_1,z_2,\cdots,z_N)=\sum_{\{k_1\cdots k_n\}}C_{k_1\cdots k_N}z_1^{mk_1}\cdots z_N^{mk_N}\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}|z_j|^2},\tag{9.5.23}$$

整数 $\{k_j\}$ 从 0 到 N，满足约束条件

$$\sum_{j=1}^{N}k_j=\frac{1}{2}N(N-1).\tag{9.5.24}$$

在通量变化中，单粒子态由 $z^n\mathrm{e}^{-|z|^2/4}$ 变为 $z^{n+1}\mathrm{e}^{-|z|^2/4}$. 如我们忽略系数 C 的变化，通量变化

导致在 Laughlin 波函数上乘一个因子 $\prod_{j=1}^{N} z_j$. 这个观察启发了 Laughlin 选择波函数 $\psi_m^{(+)}(z_0,\{z_j\})$作为准空穴态波函数,它的角动量为 $M_m^{(+)}=M_m+N$:

$$\psi_m^{(+)}(z_0,z_1,\cdots,z_N)=\exp\left(-\frac{1}{4}\sum_i z_i^* z_i\right)\prod_i(z_i-z_0)\prod_{j<k}(z_j-z_k)^m, \quad (9.5.25)$$

当任何一个电子的坐标 z_j 趋近 z_0 时,波幅趋于零,效应使在此处的电荷密度贫化. 因此这个态是准空穴.

准粒子可以通过引入一个使磁场减弱的带有一单位磁通量子的螺旋管而构成. 准粒子激发态的角动量是 $M_m^{(-)}=M_m-N$. Laughlin 波函数的相应改变通过微商算符得到

$$\psi_m^{(-)}(z_0,z_1,\cdots,z_N)=\exp\left(-\frac{1}{4}\sum_i z_i^* z_i\right)\prod_j\left(2\frac{\partial}{\partial z_j}-z_0^*\right)\prod_{j<k}(z_j-z_k)^m. \quad (9.5.26)$$

在基态 ψ_m 上面的元激发(准粒子)有着极为特殊的性质:它们有分数电荷. 图 9.13 给出说明. 一个垂直于样品平面带有通量的螺旋管通过一点,这一点就是准粒子的位置. 假定通量绝热增加从 0 到一个磁通量子,根据绝热定理,波函数仍然是$\hat{H}(t)$的本征态. 当磁通变化完成,这个本征态和原来的 ψ_m 已经很不一样了. 因为一个磁通量子可以用规范变换"除去",Hamilton 量$\hat{H}$在变化后仍和以前的相同. 变化后的本征态就是一个元激发. 为了判断元激发的性质,围绕螺线管为轴画一个圆柱面. 在通量变化后状态由 ψ_{0m}变为 $\psi_{0m\pm1}$. 这个变化导致单粒子态 r^2 期望值的改变:

$$\langle r^2\rangle = 2a_0^2(m\pm1).$$

这意味着一个单粒子态已经进入或离开了圆柱面. 填充率 $\nu=1/3$ 意味着每个态分有电荷 $e/3$. 因此准粒子和准空穴的电荷是$\pm e/3$. D. Haldane[19] 证明了在填充率为 $\nu=p/q$ 的基态上的准粒子激发的电荷是$\pm e/q$.

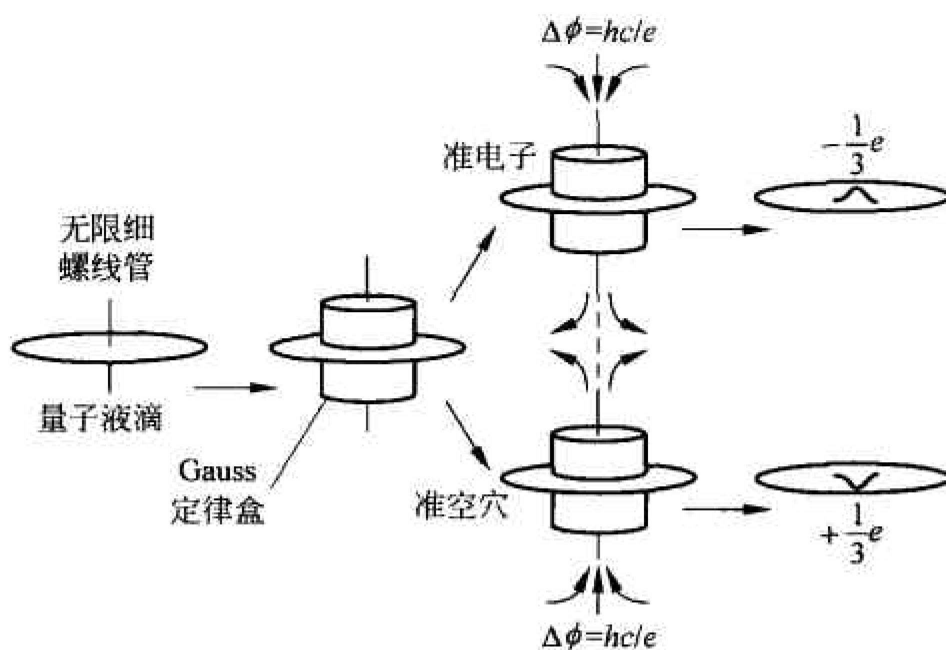


图 9.13 准粒子激发分数电荷的说明

也可以计算二维单组分等离子体的经典分布得出准粒子电荷. 假定有一个准空穴位于 z_0. 从波函数式(9.5.25)得到

$$e^{-\beta\Phi'}=\left|\psi_m^{(+)}(z_0,z_1,z_2,\cdots,z_N)\right|^2,$$

此处

$$\Phi' = -2m^2 \sum_{j<k} \ln | z_j - z_k | + \frac{m}{2} \sum_{l}^{N} | z_l |^2 - 2m \sum_{i}^{N} \ln | z_i - z_0 |.$$

在 z_0 处有一个"幽灵"电荷. 因为等效等离子体有完全屏蔽作用，围绕 z_0 处应该有电荷 $-1/m$ 单位，即 $-e/m$，e 是电子电荷.

在图 9.13 中我们把一个螺线管放在准粒子所在的地方. 下面小节将介绍另一种用涡旋的描述方法.

9.5.4 不可压缩量子流体的集体模式

许多凝聚态体系都有集体激发模式. 声波是液体和气体中的相干振荡，密度涨落诱发的压力变化起回复力作用. 声波的波长远比粒子间平均距离要大，在一个振荡周期内会发生许多粒子间的碰撞以维持局域平衡. 这种激发模式被称为流体动力学.

固体中的声子性质与此不同. 它们是量子化的晶格振动，是体系中的真实元激发，意思是它们是体系 Hamilton 量的本征态. 可以构成声子的相干态，它的表现非常像密度振荡，即介质中的声波；类似于 Schrödinger 的谐振子相干态表现得和经典谐振子一样. 因为固体可以支持切应力，所以有纵声子和横声子.

在讨论分数量子 Hall 态低能激发态之前，先介绍一些关于液态氦的研究. 超流液氦(He Ⅱ)是具有许多特殊性质的量子液体. 在 He Ⅱ 中也有声子激发. L. D. Landau 是指出作为元激发的声子和声波区别的第一人. 在液氩中有声波，但没有声子存在. 根据 Feynman 理论，当液氦中的声子波长趋于粒子平均间距时仍然有清楚的定义. 因为没有低能单粒子激发，声子是无碰撞体制(collisionless regime)下的元激发，以区别于由碰撞控制的声波.

在分数量子 Hall 液体中，粒子是带电的，并处于强磁场中. 垂直于电子速度的 Lorentz 力可以提供横向的回复力. 等离子体物理学家称纵声子模为"上杂化模"(upper hybrid mode)，横声子模为"下杂化模". 实际上磁场会混合纵向和横向运动.

从 D. Pines 的[20]文章中可以看到，根据 1953 年以前关于液氦的研究情况就能理解 Feynman 对液氦理论贡献的重要性①. Feynman 决定从第一原理开始全面研究液氦，以期得到对重要问题的回答. 我们当前讨论的问题涉及 He Ⅱ 的低能激发态. 固体中的电子可以给出低能单粒子激发态，例如在 Fermi 海下的空穴和上面的粒子. Landau 发展了量子流体动力学理论，从分析此前的关于质量热容和 He Ⅱ 第二声的实验得到了低能激发态(声子和转子)能量 E 和动量 q 之间的色散关系. Landau 认为色散关系只能由实验来确定. Feynman 所作的是"波函数的直观推导"②. 他用了一系列彼此相恰的论据得到：液体 ^{4}He 由于 Bose 统计的原因除了声子以外没有其他低能激发. 他还给出论据[21]，在 He Ⅱ 中代表激发的波函数必须有以下形式

$$\psi_{\text{ext}} = \sum_j f(\boldsymbol{r}_j) \cdot \psi_0, \tag{9.5.27}$$

此处 ψ_0 是基态波函数. 函数 $f(\boldsymbol{r})$ 的形式和激发态能量用变分原理来确定. 他找到 $f(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$，因此动量为 $\boldsymbol{q}$ 的激发态的波函数是

---

① 在这篇文章中可以找到 Feynman 对于以前工作(London，Tisza，Landau)的看法.

② 这是 Feynman 所著的 *Statistical Mechanics*(W. A. Benjamin，1972)书中关于超流体一章的标题.

$$\psi_q = \sum_j e^{iq\cdot r_j}\psi_0 \equiv \rho_q\psi_0, \tag{9.5.28}$$

相应的能量是

$$E_q = \frac{q^2}{2mS_q}. \tag{9.5.29}$$

上式被称为 Bijl-Feynman 公式. 这里 ρ_q 是密度 $\rho(\boldsymbol{r})$ 的 Fourier 变换,S_q 是二粒子关联函数

$$S_q = \frac{1}{n}\langle\psi_0 \mid \rho_q^\dagger\rho_q \mid \psi_0\rangle \tag{9.5.30}$$

的 Fourier 变换,其中 n 是 He 原子的数目. S_q 被称为液体的静态结构因子,它决定中子或 X 射线的弹性散射,可以通过实验确定. 对大的 q 值,它趋近于 1,对于小的 q 值,它的形式为 $S_q=\frac{q}{2ms}$,s 是声速. 色散关系此时为 $E_q=sq$. 它的引人注意的特点是:集体激发的激发能量是由基态的静态性质确定,即 S_q 是 $\rho_q^\dagger\rho_q$ 对基态 ψ_0 的期待值. 我们将看到,这个特点也为分数 Hall 态以及气态原子的 Bose-Einstein 凝聚体的集体激发所具有.

Feynman 进一步作为整体考虑流体的运动. 考虑以下的波函数形式

$$\Psi = \psi_0 e^{i\sum_j^N S(r_j)}, \tag{9.5.31}$$

此处 ψ_0 是基态(实)波函数,S 是空间坐标的实函数. Ψ 可以写为

$$\Psi = e^{i\int d^2 r S(r)\rho(r)}\psi_0,$$

$\rho(\boldsymbol{r})$ 是液体的密度分布[①]. 注意这个形式的相因子现在是一个向径 $\boldsymbol{r}$ 的函数. 基态的归一化是 $\psi_0 * \psi_0=n$,液体的数密度. 波函数的流密度 $\boldsymbol{j}$ 可以算出,超流体速度 $\boldsymbol{v}_s=\boldsymbol{j}/n$ 有以下形式

$$\boldsymbol{v}_s(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar}{m}\nabla S(\boldsymbol{r}). \tag{9.5.32}$$

稳定流满足连续方程 $\nabla\cdot\boldsymbol{v}_s(\boldsymbol{r})=0$,导致

$$\nabla^2 S(\boldsymbol{r}) = 0, \tag{9.5.33}$$

从式(9.5.32)也得到无旋流条件

$$\nabla\times\boldsymbol{v}_s = 0. \tag{9.5.34}$$

考虑环流

$$\Gamma = \oint \boldsymbol{v}_s\cdot d\boldsymbol{r} = \int_S \nabla\times\boldsymbol{v}_s\cdot d\boldsymbol{S}, \tag{9.5.35}$$

由于式(9.5.34),对单联通区域环流为零. 用上面的结果,Feynman 解决了一个超流现象的佯谬. 假定把在超流转变温度以下的液氦放在一个桶中,正常氦与超流氦共存,桶以角速度 ω 转动. 令 H 与 H' 分别为实验室系与和桶共同转动的坐标系中的 Hamilton 量. 它们的关系为

$$H' = H - \boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L},$$

此处

$$\boldsymbol{L} = \sum_i \boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{P}_i.$$

平衡状态可以对 H' 极小化得到. 要注意只有在转动系中桶壁才不能对体系供应能量. 在这

① 当 $\rho(r) = \sum_j \delta(r - r_j)$ 时,Ψ 就恢复式(9.5.31)的样子.

个坐标系中液体受到 Coriolis 力，它起着在体系上的一个横向探针的作用．正常流体对探针的响应是被桶壁拖动并以相同的角速度转动．人们会期待超流体将不会对横向探针作出响应并处于静止状态，因为它没有黏滞性．但实际上超流体的流动方式和正常流体十分相像！答案是超流体发展了点缺陷，即涡旋，在涡旋中心波函数为零，周围区域变为多联通的．除去在这些点缺陷处，$\boldsymbol{v}_s$ 的旋度处处为零．环流变为

$$\Gamma = \oint \boldsymbol{v}_s \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \frac{\hbar}{m}\oint \nabla S \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \frac{\hbar}{m}2\pi n, \tag{9.5.36}$$

因为波函数是单值的，S 只能以 2π 的整数倍变化．我们可以设 $S(\boldsymbol{r})=\lambda\varphi$，$\varphi$ 是辐角，因此就有

$$\boldsymbol{v}_s = \frac{\hbar}{mr}\lambda\hat{\boldsymbol{\varphi}}, \tag{9.5.37}$$

此处$\hat{\boldsymbol{\varphi}}$是在 φ 角增加方向的单位矢量．涡旋携带量子化的角动量．因为有携带角动量的涡旋存在，H'就因产生旋转液氦的稳定状态而最小化，这个状态看起来就像正常转动流体．点缺陷是奇点，在此处超流速度发散，波函数为零．

我们最后回到分数量子 Hall 流体的集体激发态[22]．这个体系与超流氦有很强的相似性，二者都是量子流体，显示无损耗超流．虽然电子是 Fermi 子，但也没有低能单粒子激发．这是因为强磁场把 Landau 能级用较大的能隙分开，能级间的跃迁相应于等离子体物理的上杂化模．Landau 能级内部的激发能量要低得多，是 Coulomb 能量 $e^2/\kappa a_0^2$ 量级．忽略零点能时最低 Landau 能级态的动能为零．仿照上述的 Feynman 理论考虑两个模

$$\Psi_k = P_1\rho_k\psi \tag{9.5.38}$$

$$\Phi_k = P_0\rho_k\psi, \tag{9.5.39}$$

此处 P_n 是投影到第 n 个 Landau 能级的算符，ψ 是体系的精确基态．由于电子间的相互作用，ψ 已经不完全在最低 Landau 能级，但还是基本上在那里．从 Ψ_k 和 Φ_k 构成的定义看出，它们是动能算符 T 的本征态：

$$T\Phi_k = 0\Phi_k, \tag{9.5.40}$$

$$T\Psi_k = \hbar\omega_c\Psi_k. \tag{9.5.41}$$

Ψ_k 对应上杂化磁等离子体子模，Φ_k 对应下杂化等离子体子模．为了保证 k 能够用来表征量子状态，我们用 Landau 规范，在边界条件上包括了规范变换．

对于磁声子（磁转子）激发模能量 $\Delta(k)$：

$$\Delta(k) = \frac{\bar{f}(k)}{\bar{S}(k)}, \tag{9.5.42}$$

此处

$$\bar{f}(k) = \frac{1}{n}\langle\psi \mid \Lambda_k^{\dagger}(\mathcal{H}-E_0)\Lambda_k \mid \psi\rangle \tag{9.5.43}$$

是投影后的振子强度，

$$\bar{S}(k) = \frac{1}{n}\langle\psi \mid \Lambda_k^{\dagger}\Lambda_k \mid \psi\rangle \tag{9.5.44}$$

是投影后的静态结构因子，

$$\Lambda_k = P_0\rho_k P_0 \tag{9.5.45}$$

是投影后的密度算符．用最低 Landau 能级单粒子波函数，Girvin 等[23,24]计算了 Λ_k，并由此

得到$\bar{f}(k)$,$\bar{S}(k)$,结果如下：

$$\bar{f}(k) = \frac{v}{2\pi}\int \frac{\mathrm{d}^2 q}{(2\pi)^2} v(q) \int \mathrm{d}^2 r[g(r) - 1]\mathrm{e}^{-|k|^2/2}. \tag{6}$$

$$[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}(\mathrm{e}^{(k^* q - k^* q)/2} - 1) + \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})\cdot\boldsymbol{r}}(\mathrm{e}^{k\cdot q} - \mathrm{e}^{k^* q})], \tag{9.5.46}$$

$$\bar{S}(k) = S(k) - (1 - \mathrm{e}^{-|k|^2/2}), \tag{9.5.47}$$

此处 q 和 k 是矢量 $\boldsymbol{q}$ 和 $\boldsymbol{k}$ 的复数表示,$g(r)$是与基态的静态结构因子的 Fourier 变换 $S(k)$(未投影)有关的二点关联函数,$\nu(q)$是库伦相互作用的 Fourier 变换. 集体激发能量尺度,即$\bar{f}(k)$的尺度,完全由 $\nu(q)$的尺度决定,因为动能被冻结了. 和液氦理论一样,在这里激发能也由基态的静态性质所决定. 但和 He Ⅱ 情况不同,这里 $S(k)$不能被测量. Laughlin 波函数被用来计算 $S(k)$. 图 9.14 给出 $\nu=1/3,1/5,1/7$ 的集体激发能量(实线). 引人注目的是,集体激发模式并非无质量模,即 $E(k)$在 $k\to 0$ 时并不是线性地趋于零. 原因是在填充因子为有理数情况下体系具有不可压缩性. $\Delta(k)$的深度极小和 He Ⅱ 的转子极小类似,相应于 $S(k)$在和粒子平均间距相关的波矢处的峰值. 质量隙随 ν 的减小而减小,这是被预言在 $\nu=1/7$ 到 1/10 时会发生的 Wigner 晶体不稳定性的先兆.

上杂化模也在文献[22]中有简单的讨论.

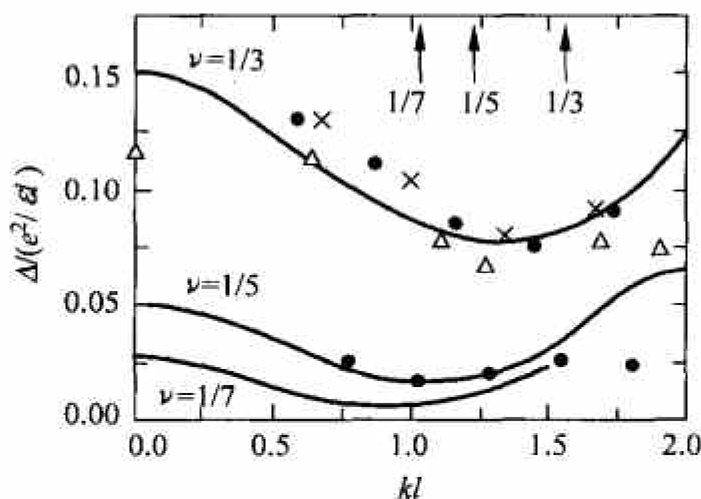


图 9.14　$\nu=1/3,1/5,1/7$(实线)的集体激发能量. 取自[4]
和小体系的数值计算相比较：叉号表示 $N=7,\nu=1/3$,球系统,
三角号表示 $N=6,\nu=1/3$,六角元胞；点号表示 $N=9,\nu=1/3$ 及 $N=7,\nu=1/3$

最后考虑量子 Hall 流体中的涡旋. 在 He Ⅱ 和 Bose-Einstein 凝聚体中,涡旋是一种超流图样. 在量子 Hall 流体中电子的状态是和磁场密切关联的. 这些量子化的涡旋实际上就是 Laughlin 的分数电荷粒子. 可以将这些激发态的波函数写作[①]

$$\Phi = \exp\left(\sum_{j=1}^{N} \mathrm{i}\varphi(\boldsymbol{r}_j) + \ln|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_0|\right)\psi_m, \tag{9.5.48}$$

此处 ψ_m 是 Laughlin 波函数式(9.5.18). 用复数表示

$$z_j - z_0 = |\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_0| \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(\boldsymbol{r}_j)},$$

波函数就变为

① 此处 $\boldsymbol{r}_0$ 是奇点位置(涡旋中心),在这里波函数为零. 为了反映这个要求,在指数上包括一项 $\ln|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_0|$ 它相当于用因子 $|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_0|$ 去乘 ψ_m. 它的效应是使波函数在 $\boldsymbol{r}_0$ 为零,线性增长到中心区的边缘. 在远处这个因子的作用是被压制的.

$$\Phi = \prod (z_j - z_0)\psi_m,$$

这正是准空穴的波函数式(9.5.25).

关于准粒子的分数电荷有实验演示[25-27]. 文献[25]给出在 $\nu=2/3, 4/3, 5/3$ 附近 Hall 态的纵向电导，结果示于图 9.15. 纵向电导 σ_{xx} 与准粒子数成正比，因此依赖于温度：

$$\rho_{xx}(T) = \rho_{xx}(\infty)e^{-\Delta/kT},$$

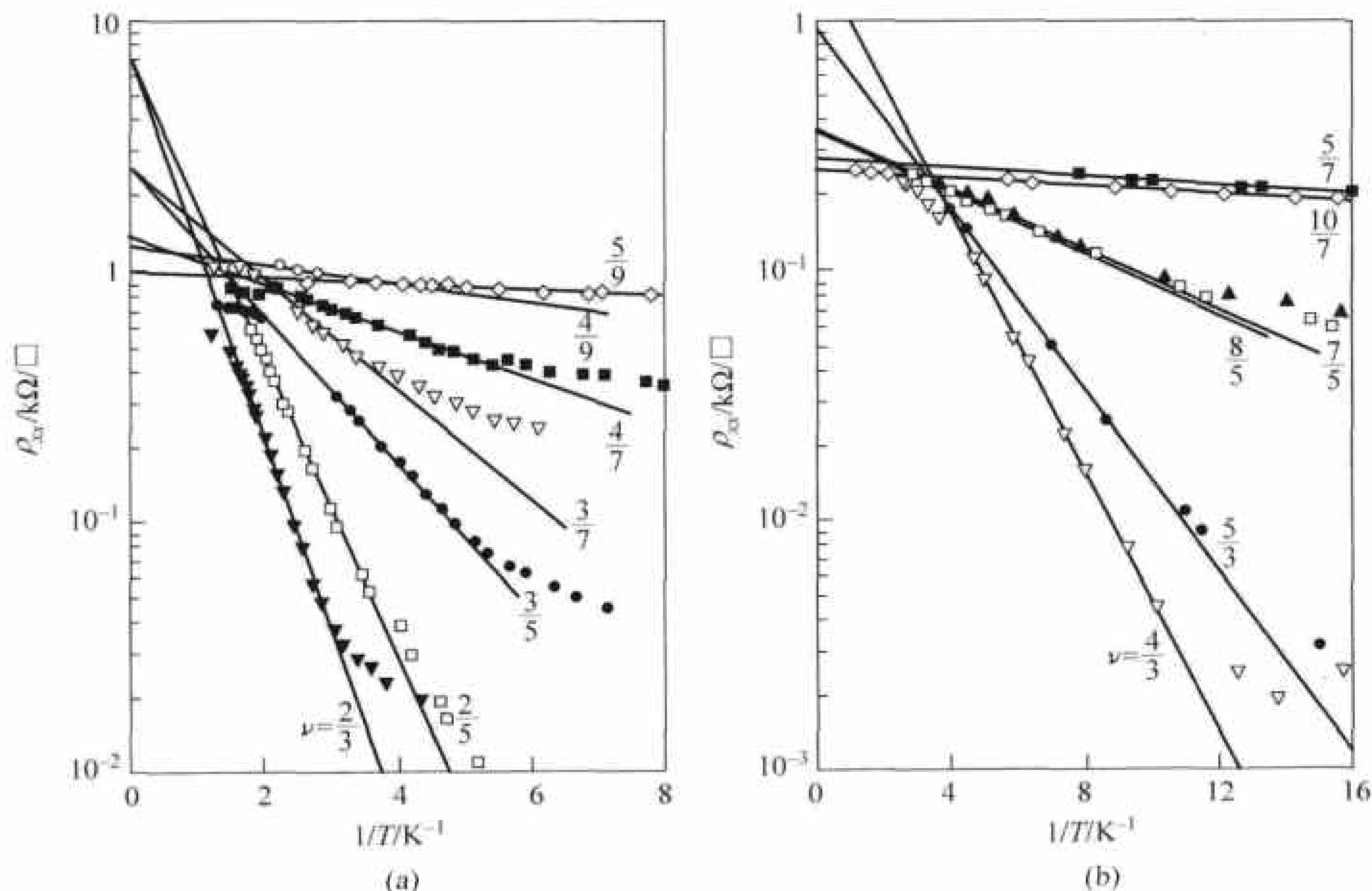


图 9.15 不同温度下分数量子 Hall 态的纵向电导[25]. 取自[25]
(a) $\nu<1$; (b) $\nu>1$

此处 Δ 是激发一个准粒子所需的能量，$\sigma_{xx}=\frac{(e/q)^2}{h}$是直线会聚之处. 这还不是直接测量. 在 19 世纪 80 年代中崔琦建议通过量测流的热噪声来确定准粒子电荷. 如果载流子在流动中是不相关联的，在零温下的热噪声应由 Schottky 公式给出 $S=2qI$，q 是载流子电荷，I 是“背散射”电流. 得到准粒子电流的困难在于它们经常要被杂质所俘获，在样品的整体中形不成电流. 文小刚[28]指出，在体系的边界准粒子能形成边缘态，因此可以沿边缘单向自由流动，提供了一维通道. C. L. Kane 和 M. P. A. Fisher[29]建议用图 9.16 所示的量子点接触实现准粒子流. 量子点接触是在分数量子 Hall 流体中的一个窄通道. 准粒子沿边缘根据标出的方向流动. 在窄隙处准粒子能隧穿一维通道之间的海峡. 在连续的流动中如何能区别电荷为 e 的粒子和数量为三倍的但电荷为三分之一的粒子? 最好的办法就是测量流的涨落，即噪声. Kane 和 Fisher 指出时间涨落容易区别打在铅屋顶上的小冰雹和质量为三倍但降下频率为三分之一的大冰雹. 因为准粒子的数目不多，它们的流动可以认为是不相关联的.

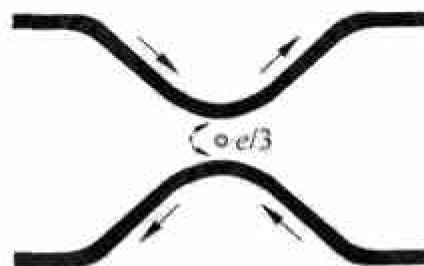


图 9.16 二维电子气的量子点接触

Weizmann 研究所的研究组[30]和法国的一个研究组[31]测量了电流的微小涨落(噪声)得到 $\nu=1/3$ 量子 Hall 态准粒子电荷 $e/3$ 的直接测定. 实验技术包括制备点接触的刻蚀工艺和对外电路噪声的过滤. 文献[31]报告了二维电子气的安排,以保证隧穿只对准粒子发生,而不是其他偶然原因. 文献[32]报告了对 $\nu=2/5$ 分数量子 Hall 态热噪声的测量,确定准粒子电荷 $e/5$.

9.5.5　分数量子 Hall 流体的无能隙边缘态

在 9.4 节中我们讨论过整数量子 Hall 态的边缘激发. Halperin 的理论可以表征为一维手征 Fermi 液体理论. 文小刚[28]指出,分数量子 Hall 态也支持无能隙激发,实际上分数量子 Hall 态的输运也是由边缘激发所控制[33]. 拓扑序的极丰富的结构通过边缘态而显示出来[34]. 因为分数量子 Hall 态本质上是多体状态,它的边缘激发就不能从单粒子波函数构造出来,即 Fermi 液体理论从一开始就不能应用①,更重要的,它的最终结果和 Fermi 液体理论完全不同. 下面我们考虑最简单的 $\nu=1/m$ 分数量子 Hall 态,并仿照文献[35]用流体动力学的方法. 出发点是,这些状态是不可压缩流体,因此没有低能的整体激发. 低能激发的唯一模式是在液滴表面的表面波. 考虑填充因子 ν 的一滴 Hall 液体,由光滑的势阱所环绕,如图 9.17 所示. 势的电场(在径向)产生沿边缘的持续流

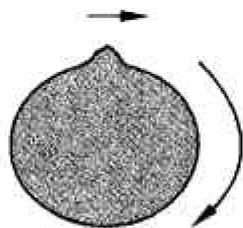


图 9.17　量子 Hall 流体的一个液滴

$$j=\sigma_{xy}\hat{z}\times\boldsymbol{E},\tag{9.5.49}$$

此处 σ_{xy} 是 Hall 电导

$$\sigma_{xy}=\nu\frac{e^2}{h}.\tag{9.5.50}$$

在交叉的 E 和 B 场中的电子漂移速度是

$$v=\frac{cE}{B}.\tag{9.5.51}$$

相应的电流密度是 $j=nev$. 用填充因子 $\nu=n\cdot 2\pi a_0^2=n\dfrac{hc}{eB}$,正好得到式(9.5.50). 令 $h(x)$ 为边缘的位移(对常数半径的偏离),x 是沿边缘的坐标. 一维密度 $\rho(x)=nh(x)$ 描画以速度 v 传播的边缘波,体内的二维电子密度是 $n=\nu/2\pi a_0^2$. 则波的传播由波动方程描述为

$$\partial_t\rho-v\partial_x\rho=0.\tag{9.5.52}$$

边缘波的能量是

$$E=\int \mathrm{d}x\rho(x)\frac{1}{2}eEh(x)=\int\mathrm{d}x\rho^2(x)\frac{\pi v}{\nu}.\tag{9.5.53}$$

在动量空间的边缘波 ρ_k 定义为

$$\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}\int\mathrm{d}k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\rho_k,\tag{9.5.54}$$

此处 L 是液滴的周长. 式(9.5.52)和式(9.5.53)变为

① 大致来说,Fermi 液体理论用和自由电子一对一的方式来处理准粒子,这样将 Fermi 子的相互作用考虑在内而不失去单粒子的概念. 在它的应用范围内是一个很成功的理论.

$$\dot{\rho}_k = \mathrm{i}vk\rho_k, \tag{9.5.55}$$

$$H = 2\pi \frac{v}{\nu} \sum_{k>0} \rho_k \rho_{-k}, \tag{9.5.56}$$

我们将能量记为 H. 将 ρ_k 当作广义坐标，记它的广义动量为 p_k，我们有

$$\frac{\partial H}{\partial p_k} = \dot{\rho}_k = \mathrm{i}vk\rho_k. \tag{9.5.57}$$

和式(9.5.56)相比，得到

$$p_k = -\mathrm{i}\frac{2\pi}{k\nu}\rho_{-k}, \tag{9.5.58}$$

因而有

$$H = \mathrm{i}v\sum_{k>0} k\rho_k p_k. \tag{9.5.59}$$

写另一个正则方程，即

$$-\frac{\partial H}{\partial \rho_k} = \dot{p}_k = -\frac{2\pi}{\nu}v\rho_{-k}, \tag{9.5.60}$$

直接取式(9.5.58)的时间微商也得到这个结果. 现在可以将理论量子化，用对易关系(设$\hbar=1$)

$$[\rho_k, p_{k'}] = \mathrm{i}\delta_{kk'}. \tag{9.5.61}$$

将式(9.5.58)与式(9.5.61)合在一起，

$$[\rho_k, \rho_{k'}] = \frac{\nu}{2\pi}k\delta_{k+k'}. \tag{9.5.62}$$

k 的值由液滴的周长决定：

$$k = \frac{2\pi}{L}\kappa, \tag{9.5.63}$$

此处 κ 是整数. 从量子化条件式(9.5.61)推得

$$[H, \rho_k] = kv\rho_k, \tag{9.5.64}$$

还有

$$[H, p_k] = -kvp_k. \tag{9.5.65}$$

代数式(9.5.62)被称为 Kac-Moody 代数. 关系式(9.5.64)和式(9.5.65)推得对于 H 的任意本征态(相应本征值 E)有

$$H(\rho_k\psi) = (E+kv)(\rho_k\psi),$$
$$H(p_k\psi) = (E-kv)(p_k\psi).$$

将$\hbar$恢复，我们看到边缘波的能谱是

$$E_k = \hbar kv. \tag{9.5.66}$$

这是低动量的色散关系，我们看到边缘激发是无能隙的，而且波是以速度 v 传播的. Kac-Moody 代数式(9.5.62)、式(9.5.63)、式(9.5.64)表征一维单枝的声子理论. 这些关系提供了一个简单分数量子 Hall 态 $\nu=1/m$ 低能边缘激发的完全描述.

上述理论牵涉电荷中性的激发. 带电激发可以用电子算符 $\psi^\dagger$ 产生. 它应在边缘上产生一个局域化的电荷，并且满足

$$[\rho(x), \psi^\dagger(x')] = \delta(x-x')\psi^\dagger(x'). \tag{9.5.67}$$

这个结果启发我们，ψ 可以表示为指数算符

$$\psi(x) \propto e^{iC\phi(x)}, \tag{9.5.68}$$

此处 C 是常数，$\phi(x)$ 是标量场. 由式(9.5.67)得到

$$[\rho(x), iC\phi(x')] = \delta(x - x'), \tag{9.5.69}$$

在动量空间，

$$[\rho_k, iC\phi_{k'}] = \delta_{k+k'}. \tag{9.5.70}$$

和 Kac-Moody 代数式(9.5.62)相比，如设 $C\nu=1$，就得到

$$k\phi_k = 2\pi i\rho_k, \tag{9.5.71}$$

最后有

$$\psi(x) \propto \exp\left[i\frac{1}{\nu}\phi(x)\right] \tag{9.5.72}$$

$$\rho(x) = \frac{1}{2\pi}\partial_x\phi(x). \tag{9.5.73}$$

要想鉴别出 ψ 确实是电子算符，就要证明 $\psi(x)\psi(x')$ 和 $\psi(x')\psi(x)$ 在 $x \neq x'$ 的反对易. 根据 Baker-Campbell-Hausdorff 公式(此处$[A,B]$是 c 数)，

$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A,B]}, \tag{9.5.74}$$

就有

$$\psi(x)\psi(y) = \psi(y)\psi(x)\exp\left(-\frac{1}{\nu^2}[\phi(x),\phi(y)]\right). \tag{9.5.75}$$

计算 Kac-Moody 对易子很繁，这里只给出结果[36]

$$[\phi(x),\phi(y)] = i\pi\nu\,\mathrm{sgn}(x-y). \tag{9.5.76}$$

因此，

$$\psi(x)\psi(y) = (-1)^{\frac{1}{\nu}}\psi(y)\psi(x), \quad 当\ x \neq y. \tag{9.5.77}$$

结论是：如果 $1/\nu$ 是奇数，ψ 就是电子算符. 对于 Laughlin 态 $\nu=1/m$ 我们用流体动力学方法得到了单枝边缘激发. 看起来简单的最终结果却是很丰富的. 自由手征 Bose 场很容易处理，因为问题是可解的[36]. 令 $L=2\pi$, $e=\nu=1$，标量场 $\phi(x)$ 的 Lagrange 量是

$$\mathcal{L} = \frac{1}{8\pi}[(\partial_0\phi)^2 - (\partial_\sigma\phi)^2], \tag{9.5.78}$$

此处的标量场满足手征约束条件

$$(\partial_0 - \partial_\sigma)\phi = 0. \tag{9.5.79}$$

$\phi(x)$ 的运动方程是

$$(\partial_0 - \partial_\sigma)(\partial_0 + \partial_\sigma)\phi = 0. \tag{9.5.80}$$

自由手征场的时空依赖是 $x-vt$，即声子传播子是

$$\langle\phi(x,t)\phi(0,0)\rangle = -\nu\ln(x - vt). \tag{9.5.81}$$

电子传播子是

$$G(x,t) = \langle T(\psi^\dagger(x,t)\psi(0,0))\rangle = \exp\left(\frac{1}{\nu^2}\langle\phi(x,t)\phi(0,0)\rangle\right) \propto \frac{1}{(x-vt)^m}. \tag{9.5.82}$$

这是出人意料的结果. 对于 Fermi 液体理论，电子传播子正比于 $1/(x-vt)$. 这意味着在分数量子 Hall 液体边缘上的电子关联很强，以至于不能被 Fermi 液体理论所描述. 这种新型的电子状态被称为手征 Luttinger 液体. 边缘电子传播子的幂次 $m=1/\nu$ 是被整体状态(填

充因子)决定的. 这个幂次是一个拓扑数,它和电子相互作用、边缘势等无关. 它可以被看作一个表征整体分数量子 Hall 态的拓扑序[34]. 在动量空间中电子传播子的形式是

$$G(k,\omega) \propto \frac{(vk+\omega)^{m-1}}{vk-\omega} \tag{9.5.83}$$

反常幂次可以在隧穿实验中测量. 隧穿态密度由下式给出:

$$N(\omega) \propto |\omega|^{m-1},$$

意味着金属-绝缘体分数量子 Hall 结的微分电导是$\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}V} \propto V^{m-1}$.

分数量子 Hall 液体边缘态的物理是一个如何解决问题的很好例子. 教科书中的例子更多是教会我们先写出 Hamilton 量,再用精确解法或近似解法解本征问题. 但有一些问题,我们根本不知道 Hamilton 量,就像分数量子 Hall 液体边缘态. 文小刚采取另一种办法. 因为分数量子 Hall 液体是不可压缩的,一定可能有无质量边缘激发. 物理直观引导他建立可能的运动方程. 然后得到可能的 Lagrange 量,建立正则变量,写出对易关系进行量子化. 一旦得到 Kac-Moody 代数,就能提出大量的问题并进行理论推导. 在 Laughlin 波函数问题中,Hamilton 量是已知的. 但处理强的多电子关联是极困难,甚至是不可能的. 从简单体系入手并成功抽出问题的关键,通过基于物理直观的成功的猜测,得到最后的解决. 我们再次看到 Feynman 说的"波函数的直观推导". 物理直观在很多重要情况下提供了指导.

对于分数量子 Hall 液体边缘态也有另外的途径. 虞跃及合作者[37]在复合 Fermi 子的基础上建立了简化的微观理论.

9.5.6 分数量子 Hall 效应的等级态

分数量子 Hall 态发生在多个系列中,涉及奇数分母的分数. 对于 $\nu<1$,有 1/3,2/3,2/5,3/5,3/7,4/7,4/9…为了理解这个多重性,D. H. M. Haldane[38]提出了一个等级模型,从一个母态可以导出一系列的基态. 考虑 Laughlin 态 $\nu=1/m$. 它是强关联电子凝集形成不可压缩流体的结果. 如果我们有这个母态的足够数量的准粒子或准空穴激发,这些元激发也可以再凝集形成 Laughlin 式的关联态,即这个等级结构中的子态. 这些子态也有分数电荷的准粒子和准空穴,它们也可以再凝集成孙态,等等.

Laughlin 波函数中电子坐标$\{z_j\}$的齐次多项式的次数是 $mN(N-1)$. 将这个数字除以 N,就是任何一个坐标的幂次 $m(N-1)$,我们称它为 Laughlin 波函数的多项式幂次. 在热力学极限下这个幂次 mN 就是以磁通量子为单位的磁通数. 准粒子/准空穴波函数的多项式幂次是

$$N_\phi = m(N-1) + \alpha N_{qp}, \tag{9.5.84}$$

此处 N_{qp}是准粒子/准空穴的数目,对准粒子 $\alpha=+1$,对准空穴 $\alpha=-1$. 从另一个角度看,当准粒子/准空穴凝集成关联态时,波函数为

$$\Psi_m^p(Z_1,\cdots,Z_{N_{qp}},z_1,\cdots,z_N) = \sum_{i<j}^{N_{qp}} (Z_i - Z_j)^p \psi_m,$$

此处$\{Z_j\}$是凝集的准粒子/准空穴的复坐标. 准粒子激发满足 Bose 统计,因此 p 应是偶数. Ψ_m^p 的齐次多项式的幂次是

$$\alpha N_{qp}(N_{qp}-1)p + mN(N-1),$$

因此这个态的多项式幂次是

$$N_\phi = \alpha \frac{N_{qp}(N_{qp}-1)}{N} p + m(N-1). \tag{9.5.85}$$

比较式(9.5.85)与式(9.5.84)得到

$$N = (n_{qp}-1)p. \tag{9.5.86}$$

式(9.5.84)和式(9.5.86)组成第一级的等级方程. 在热力学极限下第一级子态的填充因子是

$$\nu = \frac{N}{N_\phi} = \frac{1}{m + \frac{\alpha}{p}}. \tag{9.5.87}$$

各等级序列由连分数给出：

$$\nu = \cfrac{1}{m + \cfrac{\alpha_1}{p_1 + \cfrac{\alpha_2}{p_2 + \cdots}}}, \tag{9.5.88}$$

此处 m 是奇数，$\alpha_i = \pm 1$，p_i 是偶数. 所有的分数量子 Hall 等级态都可以在这个序列中找到位置.

9.5.7　复合 Fermi 子 Jain 构造法

准空穴波函数式(9.5.25)的构成提醒人们可以从另一个角度来诠释 Laughlin 波函数，J. K. Jain[39] 提出了这个导致复合 Fermi 子图画的诠释. 基本概念是

(1) 电子俘获了 $2p$ 磁通量子成为复合 Fermi 子. 因为磁通穿过的地方波函数为零，这就和电子彼此屏蔽等效.

(2) 由于屏蔽效应，复合 Fermi 子是弱相互作用的. 这使得标准的单粒子描述成为可能.

在 Laughlin $m=3$ 波函数情况下，每个电子分到 3 个磁通量子. 如果每个电子聚合了 2 个磁通量子成为复合 Fermi 子，这些复合 Fermi 子就在经过磁通聚合后的剩余磁场中运动，每个复合 Fermi 子分到一个磁通量子. 有效填充因子是 $\nu_{\text{eff}}=1$. 填充因子 $\nu=1/3$ 的电子分数量子 Hall 态变成了填充因子 $\nu=1$ 的复合 Fermi 子整数量子 Hall 态. 我们用波函数的语言来表示上面的论据. 开始将 ψ_m 重新写作

$$\psi_m(z_1,\cdots,z_N) = \sum_{i<j}(z_i - z_j)^{m-1} \cdot \chi_1(z_1,\cdots,z_N), \tag{9.5.89}$$

此处

$$\chi_1(z_1,\cdots,z_N) = \sum_{i<j}(z_i - z_j)\mathrm{e}^{-\sum_l \frac{1}{4}|z_l|^2}. \tag{9.5.90}$$

$(z_i - z_j)^{m-1}$ 的相位，即 $(m-1)\varphi_{ij}$ 代表偶数 $(m-1)$ 磁通量子附在坐标 z_i 处的电子上. 这个图像的关键之处是，电子结合了偶数磁通量子，仍然保持了 Fermi 子的性质. 这个方法给出了等级态的简单描述. 等级态可以分类为

$$\nu = \frac{n}{2n+1} = \frac{1}{3}, \frac{2}{5}, \frac{3}{7}, \cdots \text{ 等价于 } n_\phi = 2n+1;$$

$$\nu = \frac{n}{2n-1} = \frac{2}{3}, \frac{3}{5}, \frac{4}{7}, \cdots \text{ 等价于 } n_\phi = 2n-1;$$

$$\nu = \frac{n}{4n+1} = \frac{1}{5}, \frac{2}{7}, \frac{3}{13}, \cdots \text{ 等价于 } n_\phi = 4n+1;$$

$$\nu = \frac{n}{4n-1} = \frac{2}{7}, \frac{3}{11}, \cdots \text{ 等价于 } n_\phi = 4n-1.$$

在这里 $n_\phi=2n+1$ 可以诠释为每个电子与 2 个磁通量子耦合，剩余的有效磁场就是每个符合 Fermi 子分到 1 个磁通量子. $n\phi=2n-1$ 可以诠释为在每个电子结合了 2 个磁通量子后与原磁场方向相反的有效磁场. 结果也是复合 Fermi 子的整数量子 Hall 效应. 其他状态也可以类似地诠释. 粒子-空穴对称性给出另外的状态：

$$\nu = 1 - \frac{n}{2pn \pm 1}.$$

Jain 的构造法建立了分数和整数量子 Hall 效应的联系，提供了统一的观点. 此外它还提供了用适宜于弱相互作用体系的方法来处理强关联态的可能性. 一个有趣的例子是 $\nu=1/2$ 态[40]. 这不是一个正常的量子 Hall 态. 可以将一个电子和 2 个磁通量子结合起来把它变成复合 Fermi 子. 剩余的磁场就等于零. 在没有磁场的条件下，我们可以期待在没有杂质散射的情况下复合 Fermi 子应该有明确的 Fermi 面. 这是一个 Hall 金属态. 在理论处理上电子结合磁通可以用规范变换来实现. 在对体系作出理论预言以前，先要考虑规范涨落. 这是可能的，因为复合 Fermi 子是弱相互作用的，可以用平均场和无规相近似等方法. 在文献[40]中有关于体系与相互作用有关性质的讨论.

9.6 分数量子 Hall 效应的 Landau-Ginzburg 理论

S. Girvin 和 A. MacDonald[41] 发现，对 Laughlin 波函数进行规范变换可以得到 Bose 子体系的波函数，而且这个波函数具有准长程序. 这启发人们，有可能将 Landau-Ginzburg 理论用于量子 Hall 系统. 如果能够成功，就能用这个理论来讨论量子 Hall 系统的低能定态和输运性质.

9.6.1 张首晟-Hansson-Kivelson 映射，陈省身-Simons-Landau-Ginzburg 作用量

张首晟、H. Hansson 和 S. Kivelson[42] 提出了一个将量子 Hall 态映射到 Bose 体系状态的规范变换.

有多个电子位于电磁场（以势 A_0，$\boldsymbol{A}$ 描述）中，它们之间有相互作用（以 $V(x_i-x_j)$ 描述），系统的 Hamilton 量是

$$H = \frac{1}{2m}\sum_i \left[\boldsymbol{p}_i - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(x_i)\right]^2 + \sum_i eA_0(x_i) + \sum_{i<j} V(x_i - x_j) \tag{9.6.1}$$

本征波函数 $\Psi(x_1,\cdots,x_n)$ 满足 Schrödinger 能量本征方程，即有

$$H\Psi(x_1,\cdots,x_n) = E\Psi(x_1,\cdots,x_n), \tag{9.6.2}$$

$\Psi(x_1,\cdots,x_n)$ 对任何一对坐标的交换是反对称的. 进行规范变换，即

$$\Psi(x_1,\cdots,x_n) = U\Phi(x_1,\cdots,x_n), \tag{9.6.3}$$

其中

$$U = \exp\left[-\mathrm{i}\sum_{i<j}\frac{\theta}{\pi}\alpha_{ij}\right]. \tag{9.6.4}$$

式中 θ 是一个参量，α_{ij} 是粒子 j 到 i 的坐标连接线与 x 轴间的夹角. 相应的变换后的 Hamilton 量是

$$H' = \frac{1}{2m}\sum_i\left[\boldsymbol{p}_i - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(x_i) - \frac{e}{c}\boldsymbol{a}(x_i)\right]^2 + \sum_j eA_0(x_i) + \sum_{i<j}V(x_i - x_j), \quad (9.6.5)$$

此处

$$\boldsymbol{a}(x_i) = \frac{\Phi_0}{2\pi}\frac{\theta}{\pi}\sum_{j\neq i}\nabla_i\alpha_{ij}, \quad (9.6.6)$$

在参数

$$\theta = (2k+1)\pi \quad (9.6.7)$$

条件下（k 是整数），新本征函数满足

$$H'\Phi(x_1,\cdots,x_n) = E\Phi(x_1,\cdots,x_n). \quad (9.6.8)$$

式(9.6.8)中的本征值和式(9.6.2)中的相同. 重要的是，Φ 对于任何一对坐标的交换都是对称的. 对称性的变化是由于在 U 中的角度 α，它在 i 与 j 互换时给出

$$\alpha_{ji} = \alpha_{ij} + \pi. \quad (9.6.9)$$

因此在 $\theta=(2k+1)\pi$ 条件下，这个交换导致 U 给出一个附加因子 $e^{-i(2k+1)\pi} = -1$. 交换（式(9.6.5)）的结果证明如下. 将式(9.6.3)代入式(9.6.2)，左乘以 U^{-1}. 若能证明

$$U\left[\boldsymbol{p}_i - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(x_i) - \frac{e}{c}\boldsymbol{a}(x_i)\right]U^{-1} = \boldsymbol{p}_i - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(x_i)$$

就能得到式(9.6.8). 而上式左方 U 与 x_i 的函数对易，此外用式(9.6.4)直接计算给出

$$\begin{aligned}U\boldsymbol{p}_iU^{-1} &= \boldsymbol{p}_i + \hbar\frac{\theta}{\pi}\sum_{i<j}\nabla_i\alpha_{ij} = \boldsymbol{p}_i + \frac{e}{c}\frac{\Phi_0}{2\pi}\sum_{i<j}\nabla_i\alpha_{ij}\\ &= \boldsymbol{p}_i + \frac{e}{c}\boldsymbol{a}(x_i),\end{aligned}$$

即式(9.6.5)成立的条件得到满足. 统计性的变化称为“统计嬗变”，因此 $\boldsymbol{a}(x_i)$ 被称为“统计规范场”. 它不影响本征值，而只是把反对称的 Ψ 变成了对称的 Φ. 证明了 Ψ 与 Φ 的本征问题等价以后，就可以用 Bose 子表示进行以下的讨论，以借用已经发展得比较成熟的处理 Bose 子的方法. 式(9.6.5)、式(9.6.8)所决定的本征问题是用多粒子形式表示的，应用范围更广泛、更灵活的是二次量子化形式以及路径积分形式. 引入 Bose 场算符 $\varphi,\varphi^{\dagger}$，它们满足对易关系

$$[\varphi(x),\varphi^{\dagger}(y)] = \delta^2(x-y), \quad (9.6.10)$$

此处 x 及 y 为二维矢量. H 的二次量子化形式为

$$\begin{aligned}H =& \int d^2x\varphi^{\dagger}(x)\left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(x) - \frac{e}{c}\boldsymbol{a}(x)\right)^2 + eA_0(x)\right]\varphi(x)\\ &+ \frac{1}{2}\int d^2x d^2y\delta\rho(x)V(x-y)\delta\rho(y).\end{aligned} \quad (9.6.11)$$

$\rho(x)=\varphi^{\dagger}(x)\varphi(x)$ 是密度算符，$\delta\rho(x)=\rho(x)-\bar{\rho}$ 是对平均密度 $\bar{\rho}$（c 数）的偏离. 式(9.6.6)的二次量子化形式为

$$a^{\alpha}(x) = -\frac{\Phi_0}{2\pi}\frac{\theta}{\pi}\varepsilon^{\alpha\beta}\int d^2y\frac{x^{\beta}-y^{\beta}}{|x-y|^2}\rho(y). \quad (9.6.12)$$

得此式时，可以令 $x_i\equiv x, x_j\equiv y$，然后计算 $\nabla_x\alpha_{xy}$：令 x 在 x 轴方向有一增量 dx_1，计算 $(d\alpha)_i$，

它是$\frac{\mathrm{d}x_1\sin\alpha}{|x-y|}$,故$(\nabla_x a_{xy})_1=\frac{y_2-x_2}{|x-y|^2}$.同样,$(\nabla_x a_{xy})_2=-\frac{y_1-x_1}{|x-y|^2}$.式(9.6.12)中$\varepsilon^{\alpha\beta}$是反对称(二秩)张量.从式(9.6.12)可以看出,$\boldsymbol{a}$完全由$\rho=\varphi^{\dagger}\varphi$决定,因此它并不是一个独立的动力学量.但在理论框架中还要知道它所满足的运动方程,就好像电磁势A_μ所满足的方程一样,这样才能写出体系的 Lagrange 量及作用量.$\boldsymbol{a}$所满足的方程从式(9.6.12)便可得到.取规范$\partial_\alpha a^\alpha=0$[①],式(9.6.12)就是以下微分方程的解:

$$\varepsilon^{\alpha\beta}\partial_\alpha a_\beta(x)=\Phi_0\frac{\theta}{\pi}\rho(x). \tag{9.6.13}$$

方程不含对时间的演化,因此还需取对时间的微商:

$$\varepsilon^{\alpha\beta}\partial_\alpha\dot{a}_\beta(x,t)=\Phi_0\frac{\theta}{\pi}\dot{\rho}(x,t)=-\Phi_0\frac{\theta}{\pi}\partial_\alpha j^\alpha, \tag{9.6.14}$$

式中φ场密度ρ的时间导数,可以通过连续方程$\dot{\rho}+\partial_\alpha j^\alpha=0$表示为守恒流$j^\alpha$的散度.此式给出

$$\varepsilon^{\alpha\beta}\dot{a}_\beta(x,t)=-\Phi_0\frac{\theta}{\pi}j^\alpha. \tag{9.6.15}$$

式(9.6.13)、式(9.6.15)一起给出$\boldsymbol{a}$的运动方程:$\boldsymbol{a}$的空间和时间导数由φ场的密度及流密度ρ和j^α决定,它们可以由 Chern(陈省身)-Simons Lagrange 量导出:

$$\mathscr{L}=\frac{e}{2}\left(\frac{\pi}{\theta}\right)\frac{1}{\Phi_0}\varepsilon^{\mu\nu\rho}a_\mu\partial_\nu a_\rho-ea_\mu j^\mu, \tag{9.6.16}$$

三维矢量$a_\mu(a_0,\boldsymbol{a})$包含了 0 分量(时间分量)$a_0$,它是作为 Lagrange 乘子场引入的.$\mathscr{L}$对$a_0$的变分置为 0 给出式(9.6.13),对$\boldsymbol{a}$的变分置为 0 给出方程

$$\varepsilon^{\alpha\beta}(\partial_\beta a_0-\partial_t a_\beta)=\Phi_0\frac{\theta}{\pi}j^\alpha,$$

在$a_0=0$的规范中它和式(9.6.15)相同.将式(9.6.16)和φ场的 Lagrange 量合在一起,并将它们的耦合项写在φ场的 Lagrange 量内,得到体系的 Chern-Simons-Landau-Giuzburg (CSLG)作用量[②]

$$S=S_a+S_\varphi=\int\mathrm{d}^3x\mathscr{L}_a+\int\mathrm{d}^3x\mathscr{L}_\varphi, \tag{9.6.17}$$

此处

$$\mathscr{L}_a=\frac{e\pi}{2\theta\Phi_0}\varepsilon^{\mu\nu\rho}a_\mu\partial_\nu a_\rho, \tag{9.6.18}$$

$$\begin{aligned}\mathscr{L}_\varphi&=\varphi^{\dagger}(\mathrm{i}\hbar\partial_t-e(A_0+a_0))\varphi\\&-\frac{1}{2m}\left|\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}-\frac{e}{c}\boldsymbol{a}\right)\varphi\right|^2-\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^3y\delta\rho(x)V(x-y)\delta\rho(y).\end{aligned} \tag{9.6.19}$$

体系的热力学性质及电磁响应就完全包含在路径积分(配分函数)之中:

$$Z[A_\mu]=\int[\mathrm{d}a_\mu][\mathrm{d}\varphi]\exp(\mathrm{i}S_a[a_\mu]+\mathrm{i}S_\varphi[A_\mu+a_\mu,\varphi]). \tag{9.6.20}$$

以上的 Bose 子描述,在$\theta=(2k+1)\pi$的条件下是与原始的多电子量子 Hall 问题完全等价的.它将量子 Hall 流体与 Bose 子超流体联系起来,而对后者已发展了许多研究方法,如平

---

① 在 3+1 维理论中这是 Lorentz 规范,在 2+1 维理论中它被称为 Landau-Lorentz 规范.

② Bose 流体φ是用 Landau-Ginzburg 理论描述的,但包括进来 Chern-Simons 统计规范势$\boldsymbol{a}$,故总称为 CSLG 理论.

均场理论、无规相近似等,都可以借鉴.

式(9.6.13)用通常矢量符号写出,是

$$\nabla\times \boldsymbol{a}(x) = (2k+1)\Phi_0 n_s(x), \tag{9.6.21}$$

此处明确规定 $\theta=(2k+1)\pi$,并将 ρ 改写成 n_s(表面密度).

从反对称波函数到对称波函数,是从 Fermi 子变成了 Bose 子,但这并不是指物理发生了变化. $\Phi(x_1,\cdots,x_n)$所描述的系统除了与 φ、$\boldsymbol{A}$ 相互作用外还和"统计规范场 $\boldsymbol{a}(x)$"相互作用,而从式(9.6.21)看,应有

$$\oint \boldsymbol{a}(x)\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} = (2k+1)\Phi_0 n. \tag{9.6.22}$$

此处闭合路径积分所包含的面积内有 n 个电子,即"统计规范场"的作用就是赋予每个电子以 $2k+1$ 单位的磁通量子. 赋予奇数磁通量子可以改变统计性质,即从 Fermi 子变成 Bose 子,或相反. 赋予偶数磁通量子则不改变统计性质,这就是 $\boldsymbol{a}$ 被称为"统计规范场"的原因. 9.5.7 节讨论的 Jain 构造法和复合 Fermi 子就属于后者.

9.6.2　平均场解,分数量子 Hall 效应现象学

从作用量式(9.6.19)出发,取平均场解. 我们将发现分数量子 Hall 效应与超流现象学之间有极密切的对应关系. 令外场 A_μ 为垂直于体系平面的均匀磁场(沿 $-z$ 方向),即有

$$\varepsilon^{\alpha\beta}\partial_\alpha A_\beta = -B. \tag{9.6.23}$$

可以猜出平均场解是

$$\varphi(x) = (\bar{\rho})^{\frac{1}{2}},\quad \boldsymbol{a}(x) = -\boldsymbol{A}(x),\quad a_0(x) = 0. \tag{9.6.24}$$

可以验证,解(9.6.24)确实满足从 CSLG 作用量导出的所有方程,但方程(9.6.13)的满足要求一个条件. 式(9.6.13)在平均场情况下形式是

$$\varepsilon^{\alpha\beta}\partial_\alpha a_\beta = \Phi_0\,\frac{\theta}{\pi}\bar{\rho}.$$

将解(9.6.24)代入,并用式(9.6.23),得

$$B = \Phi_0\,\frac{\theta}{\pi}\bar{\rho}.$$

将磁通密度 B/Φ_0 记为 ρ_A,则填充因子 ν 是

$$\nu = \frac{\bar{\rho}}{\rho_A} = \frac{\pi}{\theta} = \frac{1}{2k+1}. \tag{9.6.25}$$

平均场解式(9.6.24)成立的条件正是 $\theta=(2k+1)\pi$,即 Fermi 子到 Bose 子映射成立的条件,亦即分数量子 Hall 态的条件 $\nu=\frac{1}{2k+1}$.

如果将 Bose 子所带的磁通均匀分布在表面上,它将刚好抵消原有的磁场,即 Bose 子现在感受不到磁场了. 以上变换的结果可以用图 9.18 表示. 在低温无磁场条件下,Bose 子是可以发生 Bose-Einstein 凝聚的. 这就可以把分数量子 Hall 态和超导、超流类比,得出一系列重要结果. 由于对超流和超导理论的系统而深刻的理解,将分数量子 Hall 态与之类比不仅能对已知现象给予更深刻的解释,而且还可以作出新的理论预言.

先从量子 Hall 效应的现象解释开始. 带电 Bose 子凝聚后,超流体内部出现 Meissner 效应(Cooper 对发生 Bose 凝聚后会禁戒超导体内部存在磁通. 杂质处可以钉扎磁通,这是

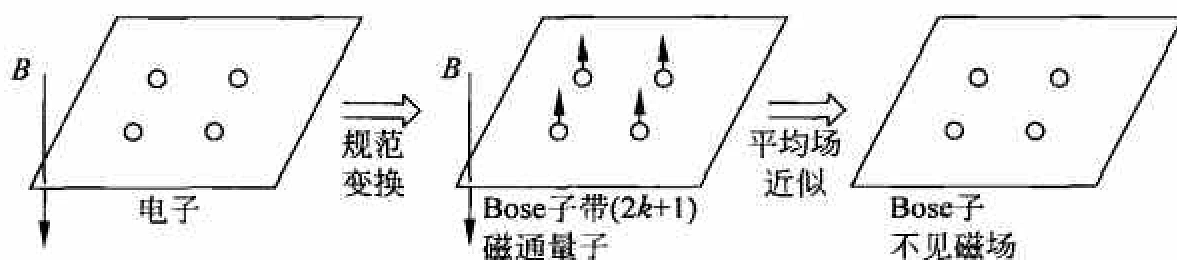


图 9.18 $\nu=\frac{1}{2k+1}$分数量子 Hall 态描述方法的改变

第二类超导体). 这个效应使 $\nu=1/(2k+1)$态成为“不可压缩的量子流体”. 原因是：根据式(9.6.21)，电子密度的任何改变都要引起统计规范场 a 的改变，即要在一定的区域内产生净磁通，这是 Meissner 效应所不允许的. 因此，在 $\nu=1/(2k+1)$态下流体密度不能改变，成为很稳定的结构.

一个容易提出的问题是，既然 Bose 子看不到磁场，没有磁场又怎么能产生 Hall 效应呢? Bose 子不仅带电荷而且携带磁通$(2k+1)\Phi_0$. 当 Bose 子沿 x 轴运动时它给出的电流 $I=e\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t}$，此处 N 是单位时间通过样品 y 方向断面的粒子数. 它们携带的磁通量流是

$$\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}t}=(2k+1)\Phi_0\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t}.$$

根据 Faraday 定律，这样的磁通量变化率给出横向电势差

$$U_{\mathrm{H}}=\frac{1}{c}\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{c}(2k+1)\Phi_0\frac{I}{e}=(2k+1)\frac{h}{e^2}I,$$

因此横向电阻是 $\rho_{xy}=\frac{U_{\mathrm{H}}}{I}=(2k+1)\frac{h}{e^2}$.

这种带有磁通的 Bose 子常被称为“复合 Bose 子”. 在复合 Bose 子描述中整数与分数量子 Hall 效应是处于同类地位的. 以 $\nu=\frac{1}{3}$的分数量子 Hall 态为例，一个电子带有 $3\Phi_0$ 磁通而成为 Bose 子，它们看不到磁场而凝聚. $\nu=1$ 的整数量子 Hall 态每个电子带 Φ_0 磁通，也变为 Bose 子，它们看不到磁场而凝聚. 二者没有分别.

用复合 Bose 子描述与超流的类比，可以研究分数量子 Hall 态的准粒子激发，结果得到分数电荷的状态. 还可以证明它们满足“分数统计”[44]. 和第二类超导体(磁通钉扎)类比，得到涡旋钉扎以解释平台的存在，和超流体的类比得到分数量子 Hall 态的集体激发等[43].

对一系列的特殊填充状态$\left(例\ \nu=1,\nu=\frac{1}{3}\right)$，纵向电阻为 0，这是完全传导状态. 在 Fermi 子描述中，这不易理解. 在复合 Bose 子描述中，由于 Bose-Einstein 凝聚形成超流体，Bose 子带电，自然形成完全传导.

对外电磁场的响应也可以逐步得到. 首先对路径积分积去 φ 场得到电磁势 $A_\mu+a_\mu$ 的有效作用量. 再积去 a_μ 得到外矢量势 A_μ 的有效作用量 S_A. 体系的普遍电磁响应 $D_{\mu\nu}(q)$从关联函数得到

$$D_{\mu\nu}(q)=\frac{\delta^2 S_A}{\delta A_\mu(-q)\delta A_\nu(q)}.$$

9.6.3 代数非对角长程序

CSLG 作用量不仅能给出分数量子 Hall 效应的宏观现象学，还能推导得出 Laughlin 波函数以及 Girvin 和 MacDonald 的非对角长程序. 注意到 $\mathscr{L}_a$ 对 a_0 变分所得的方程为[①]

$$\mathrm{i}\varepsilon^{\alpha\beta}(q_\alpha a_\beta(\boldsymbol{q},\omega)-q_\beta a_\alpha(\boldsymbol{q},\omega))=\frac{2\theta}{e}\rho(\boldsymbol{q},\omega).$$

用规范条件 $q_\alpha a^\alpha=0$ 整理上式，得

$$a_\alpha(\boldsymbol{q},\omega)=\frac{2\theta}{e}\varepsilon^{\alpha\beta}\frac{\mathrm{i}q_\beta}{q^2}\rho(\boldsymbol{q},\omega). \tag{9.6.26}$$

对 a 的泛函积分就相当于在路径积分中将积分用 δ 泛函 $\delta\left[a_\alpha(\boldsymbol{q},\omega)-\frac{2\theta}{e}\varepsilon^{\alpha\beta}\frac{\mathrm{i}q_\beta}{q^2}\rho(\boldsymbol{q},\omega)\right]$代替. 由此，$\mathscr{L}_\phi$(式(9.6.19))在$(\boldsymbol{q},\omega)$空间中变为

$$\begin{aligned}\mathscr{L}_\varphi^{\mathrm{eff}}=&\varphi^\dagger(\boldsymbol{q},\omega)\left[\omega-\frac{1}{2m}q^2\right]\varphi(\boldsymbol{q},\omega)-\frac{1}{2}\delta\rho(-\boldsymbol{q},-\omega)V(q)\delta\rho(\boldsymbol{q},\omega)\\&-2\theta\delta\rho(-\boldsymbol{q},-\omega)\varepsilon^{\alpha\beta}\frac{\mathrm{i}q_\alpha}{q^2}j^\beta(\boldsymbol{q},\omega)-\frac{2\bar{\rho}\theta^2}{m}\delta\rho(-\boldsymbol{q},-\omega)\frac{1}{q^2}\delta\rho(\boldsymbol{q},\omega).\end{aligned} \tag{9.6.27}$$

此处

$$j^\alpha(x)=\frac{\mathrm{i}e}{2m}(\varphi^\dagger\partial^\alpha\varphi-\varphi\partial^\alpha\varphi^\dagger). \tag{9.6.28}$$

式(9.6.27)右边第三项来自展开式(9.6.19)第二项时的$\partial_\alpha a^\alpha$ 项，第四项来自展开的 $a_\alpha a^\alpha$ 项. 继续讨论时要作出一个关键性假定，即讨论基态性质时不考虑涡旋的存在. 此时 j^α 是纯纵向的，即 $j^\alpha\propto\partial^\alpha\Theta$($\Theta$ 是 Bose 子场的相位). 因此有 $\varepsilon^{\alpha\beta}q_\alpha q_\beta=0$，即第三项为 0，此时 $\mathscr{L}^{\mathrm{eff}}$就很简单：第二项是原 Hamilton 量的相互作用 $V(x)$项，第四项在恢复粒子图像时用 $\delta\rho(x)=\sum_i\delta(x-x_i)-\bar{\rho}$ 以及 $a_0^{-2}=2\pi\bar{\rho}/\nu$[②] 代入就变为[③]

$$\begin{aligned}&\frac{\bar{\rho}}{2m}\frac{2\pi}{\nu^2}\int\mathrm{d}x\mathrm{d}y\delta\rho(x)\ln|x-y|\delta\rho(y)\\&=\frac{1}{m}\frac{1}{a_0^2}\left[\sum_{i<j}\ln|x_i-x_j|^{1/\nu}-\frac{1}{4a_0^2}\sum_i|x_i|^2\right].\end{aligned} \tag{9.6.29}$$

至此也可以推导代数非对角长程关联函数. 由于 $\varphi(x)=\sqrt{\rho(x)}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Theta(x)}$，略去振幅部分的涨落，$\varphi(x)$的关联涨落就和 $\Theta(x)$的关联涨落有关. 将 $\varphi=\sqrt{\rho}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Theta}$代入式(9.6.27)，有

$$\begin{aligned}\mathscr{L}^{\mathrm{eff}}=&\delta\rho(-\boldsymbol{q},-\omega)\mathrm{i}\omega\Theta(\boldsymbol{q},\omega)-\frac{\bar{\rho}}{2m}\Theta(-\boldsymbol{q},-\omega)q^2\Theta(\boldsymbol{q},\omega)\\&-\frac{1}{2}\delta\rho(-\boldsymbol{q},-\omega)\left[V(q)+\frac{4\pi^2\bar{\rho}}{m\nu^2}\frac{1}{q^2}\right]\delta\rho(\boldsymbol{q},\omega).\end{aligned} \tag{9.6.30}$$

对 $\delta\rho$ 积分，就得到 Θ 场的有效 Lagrange 量

---

① 在$(\boldsymbol{q},\omega)$空间，取$\hbar=c=1$，因此有 $\Phi_0=\frac{2\pi}{e}$.

② $a_0^{-2}=eB=\frac{2\pi B}{\Phi_0}=2\pi\rho_A=2\pi\bar{\rho}/\nu$，$a_0$ 是磁回转半径.

③ 二维 Fourier 变换：$\int\mathrm{d}^2q\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}}{\boldsymbol{q}^2}=-2\pi\ln|\boldsymbol{x}|$.

$$\mathscr{L}_{\Theta}^{\text{eff}} = \frac{1}{2}\Theta(-\boldsymbol{q},-\omega)\left[\frac{\omega^2}{V(q)+\frac{4\pi\bar{\rho}}{m\nu^2}\frac{1}{q^2}} - \frac{\bar{\rho}}{m}q^2\right]\Theta(\boldsymbol{q},\omega). \tag{9.6.31}$$

从 $\mathscr{L}_{\Theta}^{\text{eff}}$ 可以直接读出传播子，它是上式方括号的逆. 引入回转频率 $\omega_c=\frac{eB}{m}$，有①

$$\langle\Theta(-\boldsymbol{q},-\omega)\Theta(\boldsymbol{q},\omega)\rangle = \frac{\frac{2\pi}{\nu}\omega_c\frac{1}{q^2}+V(q)}{\omega^2-\omega_q^2+\mathrm{i}\delta}, \tag{9.6.32}$$

此处

$$\omega_q^2 = \omega_c^2 + \frac{\bar{\rho}}{m}q^2V(q). \tag{9.6.33}$$

将式(9.6.32)对 ω 积分，得静态关联函数

$$\begin{aligned}
&\langle\Theta(-\boldsymbol{q})\Theta(\boldsymbol{q})\rangle \\
&=-\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\langle\Theta(-\boldsymbol{q},-\omega)\Theta(\boldsymbol{q},\omega)\rangle \\
&=-\mathrm{i}\oint\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\left(\frac{2\pi\omega_c}{\nu q^2}+V(q)\right)\left[\frac{1}{\omega-\omega_q+\mathrm{i}\delta}-\frac{1}{\omega+\omega_q-\mathrm{i}\delta}\right] \\
&=-\frac{1}{2\nu}\frac{2\pi}{q^2}+O\left(\frac{1}{q}\right).
\end{aligned} \tag{9.6.34}$$

因此得到序参量关联函数②

$$\begin{aligned}
&\langle\varphi^\dagger(x)\varphi(y)\rangle = \bar{\rho}\langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Theta(x)-\mathrm{i}\Theta(y)}\rangle \\
&=\bar{\rho}\Big(1+\mathrm{i}\langle\Theta(x)\rangle+\mathrm{i}\langle\Theta(y)\rangle \\
&\quad+\frac{1}{2}\langle\Theta(x)\Theta(y)\rangle+\frac{1}{2}\langle\Theta(y)\Theta(x)\rangle+\cdots\Big) \\
&\approx\bar{\rho}\mathrm{e}^{\langle\Theta(x)\Theta(y)\rangle} = \bar{\rho}\exp\left(-\frac{1}{2\nu}\int\frac{2\pi}{q^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}q(x-y)}\right)\mathrm{d}^2q \\
&=\bar{\rho}\exp\left[-\frac{1}{2\nu}\ln|x-y|\right]=\bar{\rho}\,|x-y|^{-1/\nu}.
\end{aligned} \tag{9.6.35}$$

这就是 Girvin 和 MacDonald 用 Laughlin 波函数得到的结果. 此处直接用 CSLG 作用量及平均场近似得到了这个结果，并未参考 Laughlin 波函数. 因此 Laughlin 波函数也应能从这个理论中推导出来. 事实上，式(9.6.29)也出现在 Laughlin[17] 写出的波函数的论据中. 第一项的 $\ln|x_j-x_k|$ 是二维空间中两个电子相互作用势（作用力和 $\frac{1}{|x_j-x_k|}$ 成正比），而第二项代表正离子背景对电子的吸引势. 文献[43]给出 Laughlin 波函数的推导，此外还考虑了涡旋激发，导出了 Laughlin 准粒子和准空穴波函数式(9.5.25).

以上 $\langle\varphi^\dagger(x)\varphi(y)\rangle$ 的计算是在 $q_\alpha a^\alpha=0$ 的规范条件下进行的. 在规范变换中 $\langle\varphi^\dagger(x)\varphi(y)\rangle$ 的相角在一般情况下并不为 0，因此它不满足物理可观量必须为规范不变的要求. 实际上可以定义规范不变的序参量 $\langle O^\dagger(x)O(y)\rangle$[45]，它在 Landau-Lorentz 规范中约化为 $\langle\varphi^\dagger(x)\varphi(y)\rangle$. 在其他规范中算符 $O(x)$ 并非场算符 $\varphi(x)$ 的定域函数.

① 在传播子极点处，式(9.6.31)的方括号为 0. 因此，令方括号为 0，解出 ω，记为 ω_q，即为传播子极点，结果就是式(9.6.33).

② 用 $\langle\Theta\rangle=0$ 并用式(9.6.34). 在推导中略去了 $V(q)$，它对长程关联并不重要，且它对以下的分析没有影响.

从以上的讨论可知，分数量子 Hall 态是一种新的量子流体. 作为 Fermi 子的电子能够凝聚为流体，关键在于它们所携带的奇数磁通量子，将它们变成了 Bose 子. 这和超导体中以及超流^{3}He 中电子配成对而形成 Bose 子类似. 分数量子 Hall 态这种量子流体具有的分数电荷的元激发则是它的独特性质.

9.6.4 分数量子 Hall 流体的拓扑序

量子 Hall 流体是二维强关联电子系统的一个例子，它有一个极有趣的性质，即具有拓扑序. 凝聚态物理中在许多情况下序的产生是和 Landau 理论描述的对称破缺有关. 在量子 Hall 流体中没有对称破缺. 在 9.6 节中张首晟-Hansson-Kivelson 有效理论是在具有陈省身-Simons 项的 Ginzburg-Landau 理论基础上构建的. 文小刚和徐一鸿[52] 建立了一个只有陈省身-Simons 项的有效理论. 这个理论对于研究等级分数量子 Hall 态更为方便. 这两种有效理论间由一个对偶变换相联系[53]. 陈省身-Simons 作用量通过陈省身-Simons 势 a_μ 表示为

$$S=\int \mathrm{d}^3x\,\frac{k}{4\pi}\varepsilon^{\mu\nu\lambda}a_\mu\partial_\nu a_\lambda \tag{9.6.36}$$

此处 k 是整数. 将这个作用量和标量场作用量比较：

$$S=\int \mathrm{d}^3x\sqrt{g}\,(g^{\mu\nu}\partial_\mu\phi\partial_\nu\phi-m^2\phi^2), \tag{9.6.37}$$

此处 $g^{\mu\nu}$ 是度规张量. 陈省身-Simons 作用量和时空度规毫无关系，即没有尺和表的标度. 纯粹的陈省身-Simons 项只和时空的拓扑性质有关. 与时空度规无关有深远的后果：任何与度规有关的微扰不能影响陈省身-Simons 项. 例如杂质和无序都和度规有关，它们不能影响陈省身-Simons 项，也就不能影响量子 Hall 液体的长程性质，例如电荷和统计.

在有效理论中我们只对大的空间距离和时间间隔感兴趣，也就是小的波数和低的频率. 作用量的各项是按照微商的幂次和变量的幂次排序的. 在 2+1 维时空中，流的质量量纲是 2，规范势的量纲是 1，因为规范势和物质场是按照规范原理耦合的. 因此陈省身-Simons 项 $\varepsilon^{\mu\nu\lambda}a_\mu\partial_\nu a_\lambda$ 的量纲是 3，质量量纲最低. Maxwell 项量纲是 4，因为它包含两个微商和两个规范势幂次. 因此它按照 L^{-4}、即 M^4 标度化，在大距离不重要. 大距离的物理仅由陈省身-Simons 项控制，只要 $k\neq 0$. 对于 $\nu=1$ 的量子流体，有 $k=1$. 一般情况下有数学论据要求 k 为整数.

Laughlin $\nu=1/m$ 态是最简单的仅包含一个组分不可压缩流体的量子 Hall 态. 从波函数

$$\Psi_m=\left[\prod(z_i-z_j)^m\right]\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}\sum|z|^2}$$

可以看出当电子 j 围绕电子 i 转一圈时波函数得到一个相因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi m}$. 更一般的量子 Hall 态，诸如 $\nu=2/5,3/7,\cdots$ 包含不止一个组分不可压缩流体，有更复杂的拓扑序. 它们用矩阵元为整数的对称矩阵 K 和整数元素的矢量 Q 所表征. 当组分 i 的粒子围绕组分 j 的粒子转一圈时，波函数获得一个相因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi k_{ij}}$，此处 k_{ij} 是 K 的矩阵元. 矢量 Q 元素 Q_i 代表组分 i 流体的粒子所带的电荷(以 e 为单位). 所有与拓扑序有关的性质都由 K 与 Q 所决定，例如 $\nu=Q^TK^{-1}Q$. Laughlin 态 $1/m$ 具有 $K=m$ 与 $Q=1$，$\nu=2/5$ 态由 $\boldsymbol{K}=\begin{pmatrix}3&2\\2&3\end{pmatrix}$ 及 $\boldsymbol{Q}=\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$ 描述.

在物理上拓扑序在量子 Hall 流体不同侧面显示出来，例如基态简并度和边缘态的反常幂次. 在亏格为 G 的闭合二维表面上的量子 Hall 流体，它的基态简并度为 k^G，这里 k 是

式(9.6.36)中的参数. 亏格是表面的洞或把手的数量,例如球的亏格为零,环面的亏格为 1. 拓扑的依赖性在这里是明显的. 同样填充率的等级态用不同的构造法得到不同的波函数. 这些不同的波函数是否属于同一个等价类,可以从它们的 K 和 Q 表征来判断. 如果两种构造法的 K 和 Q 相同,它们描述的是同样的量子 Hall 流体.

拓扑序的一个引论就是分数量子 Hall 态的分数统计. 当交换两个全同粒子时,体系的波函数获得一个相因子 $e^{i\phi}$,对于玻色子 $\phi=0$,对于费米子 $\phi=\pi$. 在二维体系中,导致"交换"的粒子运动需要确切定义,因为粒子不能脱离它们所存在的平面. 交换可以定义为将一个粒子绕另一个粒子转 π 角,然后平移两个粒子,使得原来占有粒子的位置现在重被粒子占据,只是两个粒子现在被交换过了. 由于量子 Hall 体系可以看作粒子-通量复合体,一个通量管 Φ 在它附近产生一个矢量势 $\boldsymbol{A}=\frac{\Phi}{2\pi}\hat{\boldsymbol{\theta}}$. 由于准粒子 1 围绕准粒子 2 转 π 角的输运所产生的 Aharonov-Bohm 相是 $\phi_{12}=e\Phi/2$. 但在这个过程中准粒子 2 也感受到了准粒子 1 的磁通. 因此总相位是 $e\Phi$. 当存在有低能简并态、而交换在简并态上的不同准粒子对之间进行时,就形成了"编辫子"的过程. 由于两个交换过程可能不对易,因此多交换的过程应该用矩阵表示. 因此统计不仅是分数的,而且是非 Abel 的.

分数电荷可以用边缘电流的噪声测量在实验上探测[30],统计的测量就需要一个非定域的过程,在此一个准粒子围绕另一个准粒子运动. C. de C. Chamon 等人[54]最先提出了量子 Hall 体系的二点接触的干涉仪. W. Bishara 等人[55]用这样的干涉仪研究非 Abel 任意子的行为,如图 9.19 所示. 设备是一个 Hall 棒(磁通未标出)Hall 电压沿棒测量,Hall 电导垂直于棒测量. "插入门"P 使边缘准粒子围绕体准粒子运动,产生了"编辫子". P 上的电压可以调整以改变量子 Hall 液体的面积. 边缘准粒子可以在两个点接触处隧穿,其振幅为 t_1 和 t_2. 两条隧穿路径之间的量子干涉就通过随 Hall 液体面积变化时隧穿电流的振荡图样给出 Aharonov-Bohm 相的可观测特点以及编辫子统计. 对 Abel 量子 Hall 态,干涉的振荡行为可以通过仅和电荷有关的 Aharonov-Bohm 效应来理解. 对非 Abel 态(例如 $\nu=5/2$ 的分数量子 Hall 态)在体准粒子数为偶数时出现附加的振荡行为. 这个数通过在中央干涉仪区域中边缘准粒子和体准粒子之间的编辫子效应改变点接触的电导. 作者们结论观察到的变化是非 Abel 统计的明显特点,并且建议进行更多的实验以判别其他的可能原因.

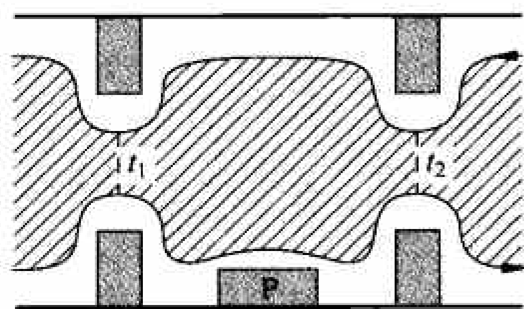


图 9.19 二点接触干涉. 取自[55]

9.7 量子 Hall 效应的整体相图

在 9.4,9.5 节的讨论中突出了描述量子 Hall 状态的参数,即填充数 $\nu=\frac{n_s}{n_B}$. 对一定填充数的状态有特征的 ρ_{xx} 与 ρ_{xy} 值. 以 ρ_{xx} 和 ρ_{xy} 为坐标,可以画出量子 Hall 效应的整体相图,这是 Kivelson、李东海和张首晟研究的继续[46,47],他们建立了"对应态定律",说明不同 ν 的状态中,不少是彼此对应(相似)的.

(1) Landau 能级变换

$$\nu \leftrightarrow \nu+1 \tag{9.7.1}$$

↔表示两个不同 ν 值体系的性质存在对应. 这是因为填满的 Landau 能级对其他电子而言类似一个惰性的背景,它对上面未填满的 Landau 能级的物理性质几乎没有影响.

(2) 粒子-反粒子变换

$$\nu \leftrightarrow 1-\nu \tag{9.7.2}$$

在真空态上建立一个 $\nu<1$ 的状态,和从一个填满的 Landau 能级(根据式(9.7.1),它和真空对应)去掉填充数为 ν 的电子是等价的.

(3) 通量赋予变换

$$\frac{1}{\nu} \leftrightarrow \frac{1}{\nu}+2 \tag{9.7.3}$$

例子是 3↔1+2,这是分数量子 Hall 效应 $\nu=1/3$ 和整数量子 Hall 效应 $\nu=1$ 之间的对应,9.6 节中已讨论过.

理论的另一个组成部分是选择规则:从绝缘态到量子 Hall 态的转换只能通过 $\nu=1$ 的整数量子 Hall 态进行. 在杂质增加或磁场减小时,所有高 ν 态只能转换到低 ν 态最终到 $\nu=1$ 态,然后才能转换到绝缘态. 得到这个定则的基础是一个"上浮假定"①. 相图示于图 9.19.

相图示于图 9.20,在相图上 ρ_{xx} 代表晶体的无序(杂质、缺陷与声子激发),它随温度 T 而变化;$\rho_{xy}=-\dfrac{B}{nec}$ 与磁场 B 成正比. 在存在无序情况下,$T\to 0$ 时有两种不同的相. 一是在 $T\to 0$ 时 $\rho_{xx}\to 0$,$\sigma_{xx}\to 0$ 的量子 Hall 流体相(见式(9.4.21)后面的讨论). 另一个是绝缘相,在 $T\to 0$ 时有 $\rho_{xx}\to\infty$,$\sigma_{xx}\to 0$,但它和普通绝缘体又有所不同. 当将半导体缺陷增加以至超过一定限度时,要保持纵向电流需施加很高的纵向电压,当 T 减小时所需电压增高,这是绝缘体的特征. 但同时 Hall 电压 U_H 和温度无关并和磁场强度成比例增加,这是 Hall 液体的特点. 这个相称 Hall 绝缘体,崔琦研究组在实验中发现了 Hall 绝缘体[48].

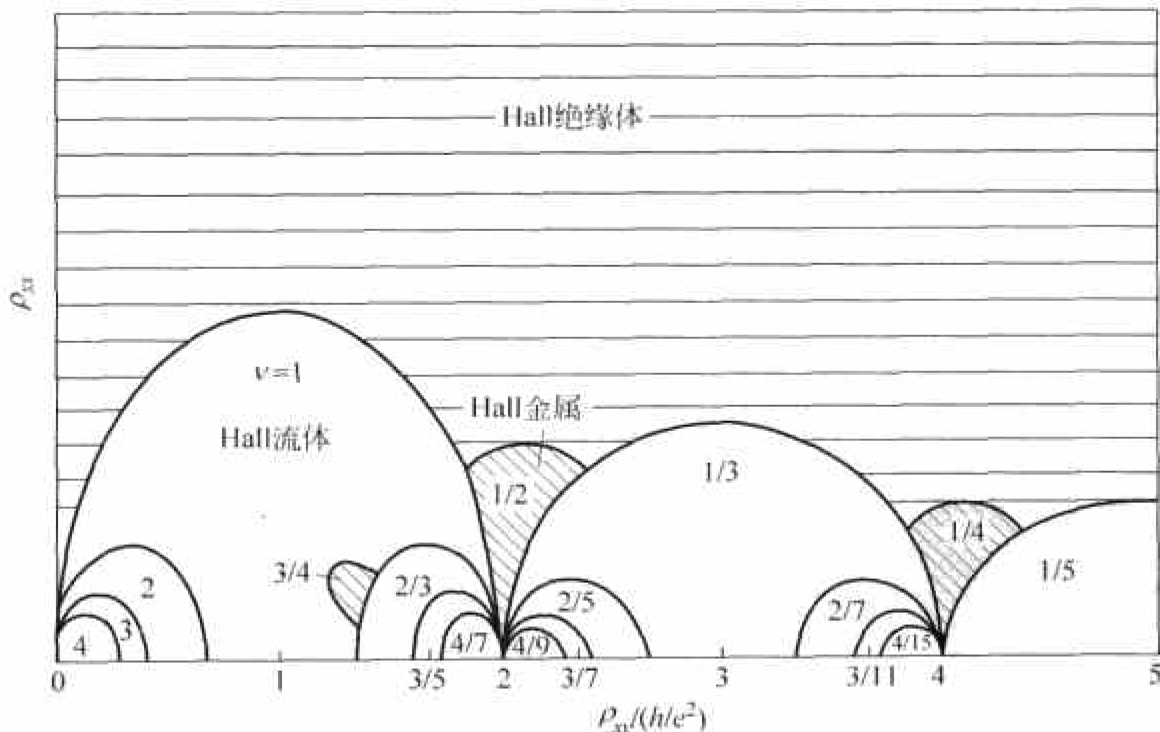


图 9.20　量子 Hall 效应的整体相图. 取自[46]

① 在整数量子 Hall 效应发现后不久,就已经知道在 Fermi 能量下面有延展态,因为纵向电导一般是有限的. Anderson 局域化告诉我们,当无序增加超过某一程度时所有二维电子系统都是绝缘的. 为了解释从量子 Hall 相互绝缘相的转变,Laughlin 和 Khmel'nizkii 提出了"上浮"假定,当磁场减小时延展态的能量从 Landau 能级中心上浮. 当 B 趋于零时,延展态的能量升到 Fermi 能量上面,使得所有 Fermi 能量下面的状态都变成局域的.

实验上还发现了另一个在 $\nu=1/2$ 附近的相. 电子和无磁场情况下普通金属中的电子一样, ρ_{xy} 随磁场线性变化, 没有量子化平台. 它称为 Hall 金属. 从引入统计规范场的变换看, 这个相的存在是容易理解的. $\nu=1/2$ 相当于一个电子分配到两个磁通量子, 用变换将磁通赋予电子, 它就成为"复合 Fermi 子". 用平均场观点将统计磁通均匀分布, 正好抵消外磁场, 其结果就是无磁场下的电子! 从通量赋予变换式(9.7.2)得知, $\nu=1/4$ 是一个对应态, 它的粒子-反粒子对应态是 $\nu=3/4$.

对应态原理被许多实验所支持, 但选择定则却与不少实验相左. 崔琦研究组[49]系统研究了绝缘体到整数量子 Hall 态的转变. 他们使用在 Ge/SiGe 量子阱中局限的二维系统. 从绝缘体到整数量子 Hall 态转变的规律是在量子 Hall 相绝缘体到整数量子 Hall 态 ρ_{xx} 随温度增加而增加, 在绝缘相它随温度增加而减小, 示于图 9.21. 在相变点(图 9.21(a), 中的 B_c^L), ρ_{xx} 与温度无关. 当 B 增加时, ρ_{xy} 首先在 ν 发展一个很窄的平台, 然后在 $\nu=2$ 处, 以及在 $\nu=1$ 处. 在 B_c^L 处绝缘态到 $\nu=3$ 整数量子 Hall 态的转变是直接的. 在更高的场值时量子 Hall 态转变到绝缘态示于图 9.21(b). 在这里, 在 B_c 处的转变是在 ρ_{xx} 曲线会合点发生. 量

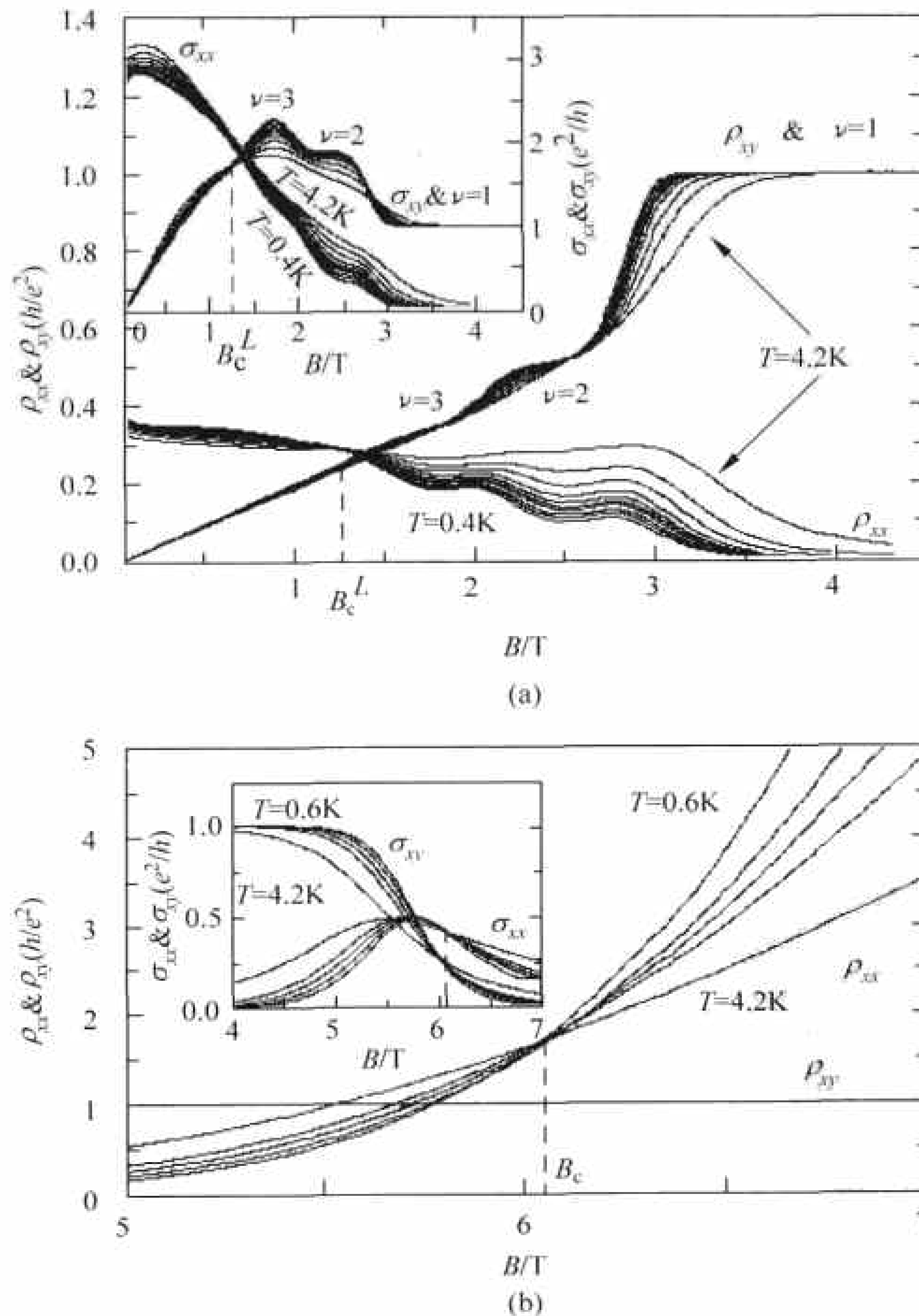


图 9.21 在温度 0.6K 和 4.2K 时 ρ_{xx} 和 ρ_{xy} 对磁场的依赖. 在插图中画出 σ_{xx} 和 σ_{xy} 对 B 的依赖. 取自[49]

(a) $n=1.2\times10^{11}\text{cm}^{-2}$; (b) $n=0.8\times10^{11}\text{cm}^{-2}$

子 Hall 态和绝缘态的转变点(黑点)以及不同 ν 的量子 Hall 态之间的转变点(圈点)示于图 9.22(a)的 n-ν^{-1} 曲线,点的大小代表预期不准确度. 为了演示 Landau 能级作为 B 的函数的转变,同样的数据作为 n-B 曲线画在图 9.22(b)上. 对高 B 值数据点精确分布在直线 $n=(i+1/2)eB/\hbar$ 上,$i=0,1,2,\cdots$ 这些直线是不同 ν 值态的边界. 最低能级 $i=0$ 之下的绝缘态可以从无序造成的能级变宽理解. 在能级展宽时,形成小能带(miniband). 在中心的是延展态. 远离中心的是局域态. 在 $T=0$ 以及 Fermi 能位于最低能级之下时,E_F 处于局域态中间,体系就是绝缘态. 当 B 减小时,能级间的能隙减小,能级发生交叠. 高能级的某些态增加了最低能级 $i=0$ 之下的态密度,导致绝缘态的边界升高. 所有的高 ν 态都直接过渡到绝缘态.

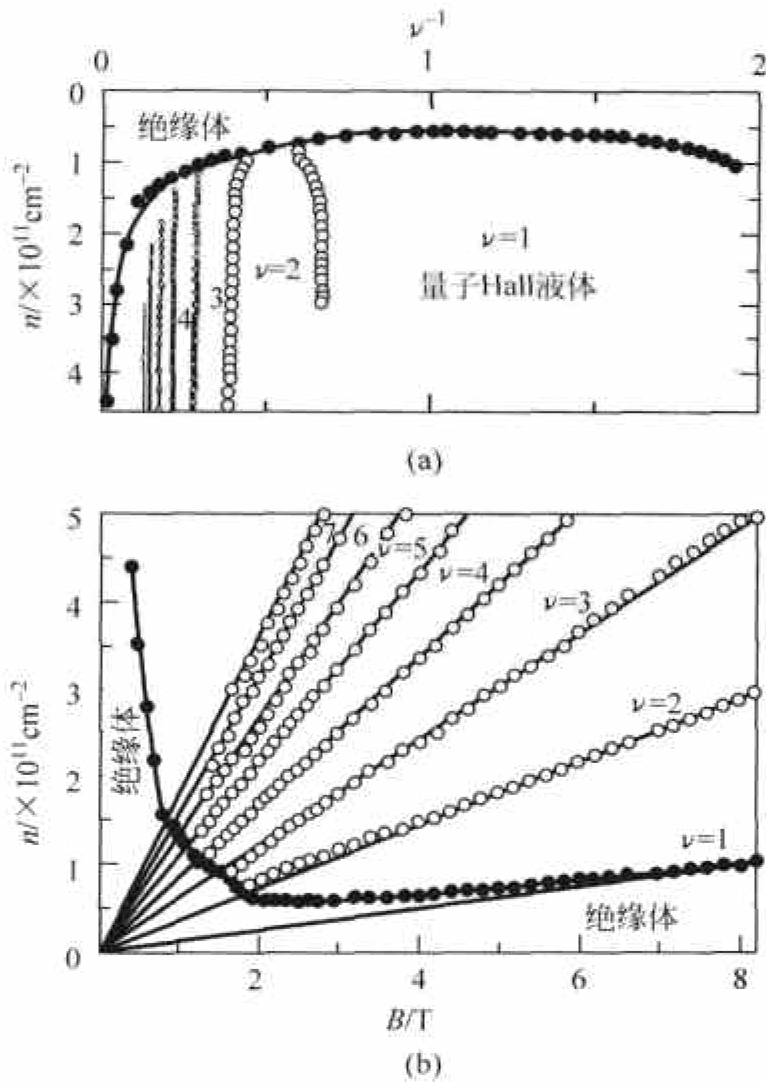


图 9.22 相图. 取自[49]

(a) $n-\nu^{-1}$ 曲线; (b) $n-B$ 曲线

盛东宁和翁征宇[50,51]进行了从绝缘态到量子 Hall 态的转换理论研究. 他们用了紧束缚格点模型. 令跳跃常数为 1 作为能量的单位,模型中有两个参数. 一个是格点单位小格的磁通量 $\phi=2\pi/M$,M 就相当于填充因子. 例如 $M=8$ 给出最大填充因子 $n\nu=8$. 另一个参数是无序强度 W. 在每一个格点处在 $-W/2$ 到 $W/2$ 间随机选定一个无序势. 用 Kubo 公式计算 Hall 电导,图 9.23 给出 $M=8$ 的结果. 在弱无序($W=1$)时可以看到 3 个整数量子 Hall 平台 $\sigma_H=\nu e^2/h(\nu=1,2,3)$,相当于 $E\leqslant0$(半个能带)位于 σ_H 跳跃处的 4 个 Landau 能级在无序增加时,平台自高能到低能一个又一个地逐次变坏.

$\nu=3$ 平台在 $W=2$ 时被毁,$\nu=1$ 平台在 $W=6$ 时崩坏. 理解整数量子 Hall 平台演化的

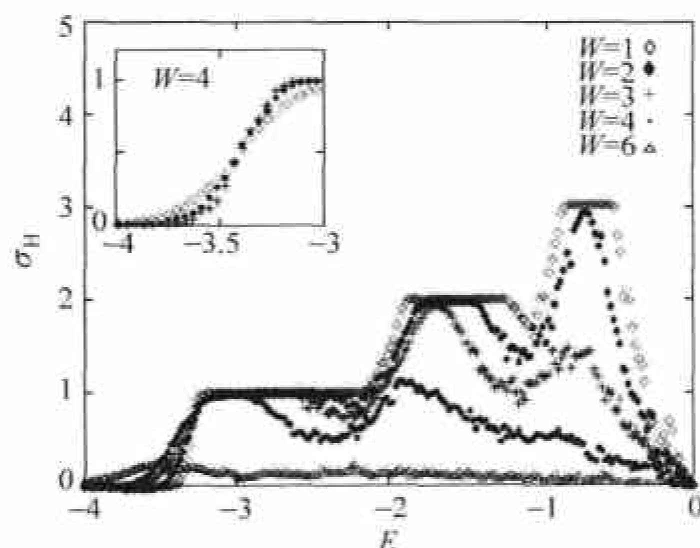


图 9.23 无序参数从 1 到 6 情况下 σ_H(计算值)与 E 的关系. 取自[50]
插图给出 $W=4$ 的 $\nu=1$ 整数量子 Hall 平台,相应不同格点点阵大小:8×8(∘),16×16(•),24×24(†)

关键是在 9.4 节中讨论的 D. J. Thouless 的拓扑考虑. 量子化的 Hall 电导是在 Fermi 能量下的延展态所携带的陈省身数之和:

$$\sigma_H(E_F) = \frac{e^2}{h}\sum_{\varepsilon(m)<E_F} C^m,$$

局域态的陈数为零. 延展态的态密度 ρ_{ext} 画于图 9.24. 明确的 ρ_{ext} 峰位于 Landau 带的中心带间是局域态布局. 每个峰对应于 σ_H 快速增长的区域. 当 Fermi 能量到达峰中所有延展态都已包括进来的那一点时就得到一个量子化的平台. 三个低能峰中每一个的总陈数都是+1,这就是当 Fermi 能量从低能端向高能变化时 $\nu=1,2,3$ 平台逐次出现的原因. $E=0$(格点半满)的 Hall 电导应该为零. 因此最接近带中心的最后的峰带有陈数−3,导致 σ_H 从 $\nu=3$ 平台降落到 0. 拓扑数守恒明确地表现了出来. 在 W 增加导致的 σ_H 平台的崩坏过程中,隔开不同平台的延展态会聚到一起然后消失,并未"上浮". 最低的延展态能带是在无序临界值 W_c 处最后消失的. 无序临界值 W_c 随磁场的减小而减小,在趋于零的场极限时可以延伸到零. 整数量子 Hall 效应崩坏的图画一直持续到弱场极限.

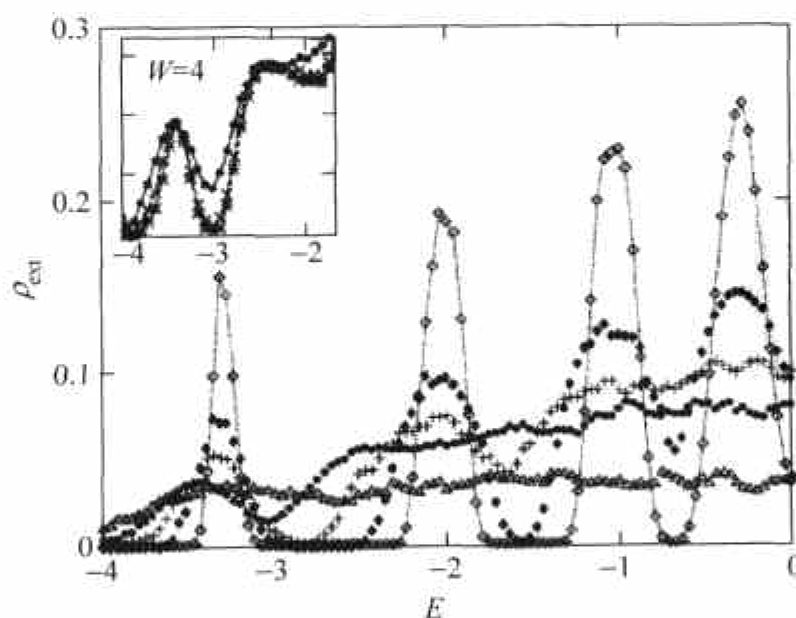


图 9.24 不同无序参数下的计算延展态密度. 取自[50]

紧束缚格点模型给出的相图示于图9.25. 有一些有趣之处. 从强磁场的绝缘态(在图中用Ⅱ标出)开始,在固定电子密度条件下连续减小B,就得到曲线A,它切过不同的整数量子Hall相. 当B减小时,W_c随之减小,因此$\frac{W}{W_c(B)}$增加. 绝缘相Ⅱ的特征是Hall电阻ρ_{xy}保持在量子化值h/e^2,甚至纵向电阻ρ_{xx}已经增加了许多倍. 绝缘相Ⅰ的特征是Hall电阻的经典值$\rho_{xy}=\frac{1}{n\nu}\frac{h}{e^2}=\frac{B}{nec}$. 相信绝缘相Ⅰ在磁场趋于零时会趋于Anderson绝缘体. 绝缘相的σ_{xx}和σ_{xy}满足一个单参数标度律,相信这是和量子相变有关的后果[49].

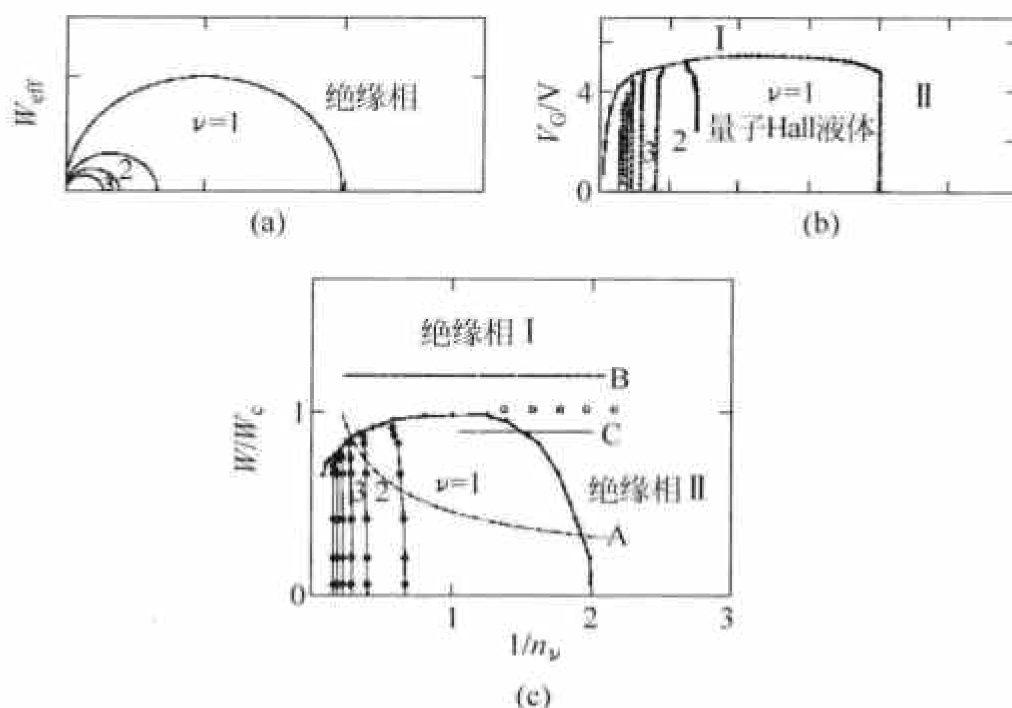


图9.25 紧束缚格点模型给出的相图. 取自[51]

这些"复合粒子"是真实的吗? 或者是一种等价的描述呢? 目前还没有明确的答案.

量子Hall效应25年来一直是凝聚态物理中十分活跃的研究领域,目前仍有不少基本问题有待继续研究. 对$\nu=1/2$态(称为$\nu=1/2$"反常")在理论上有所阐述[40],在这方面以及对Hall绝缘体了解得还不够,未来将会提供更多的新发现.

参考文献

[1] von Klitzing K, Dorda G, Pepper M. Phys Rev Lett, 1980, 45: 494.
[2] von Klitzing K. Rev Mod Phys 1986, 58: 519.
[3] Tsui D C, Störmer H L, Gossard A C. Phys Rev Lett, 1982, 48: 1559; 1983, 50: 1953.
[4] Tsui D C. Rev Mod Phys, 1999, 71: 891; Störmer H L. Rev Mod Phys, 1999, 71: 875.
[5] Prange R E, Girvin S. The Quantum Hall Effect. 2nd edition. New York: Springer, 1990.
[6] Laughlin R. Phys Rev, 1981, B 23: 5632.
[7] Halperin B I. Phys Rev, 1982, B 25: 2185.
[8] Thouless D J. Topological Considerations. In[4].
[9] Thouless D J, Kohmoto M, Nightingale M P, den Nijs M. Phys Rev Lett, 1982, 49: 405.
[10] Niu Q, Thouless D J, Wu Y S. Phys Rev, 1985, B 31: 3372.
[11] Harper P G. Proc Phys Soc(London), 1955, A 265: 317.
[12] Zil'berman G E. Sov Phys JETP, 1957, 5: 208; 1957, 6: 299.
[13] Zak J. Phys Rev, 1964, A 134: 1602.

[14] Hofstadter D G. Phys Rev,1976,B 14: 2239.
[15] Stone M. Quantum Hall Effect. Singapore: World Scientific,1992.
[16] Laughlin R. Phys Rev Lett,1983,50: 141.
[17] Laughlin R. Incompressible Quantum Fluid. In[4].
[17a] Laughlin R. Rev Mod Phys,1999,71: 863.
[18] Trugman S A,Kivelson S. Phys Rev,1985,B 31: 5280.
[19] Haldane F D M. Phys Rev Lett,1983,51: 605.
[20] Pines D. Phys Today 1989,42 (2): 61.
[21] Feynman R P. Phys Rev,1954,94: 262.
[22] Girvin S M. Collective Excitations. In[5].
[23] Girvin S M,Jach T. Phys Rev,1984,B 29: 5617.
[24] Girvin S M,MacDonald A H,Platzman P M. Phys Rev Lett,1985,54: 581; Phys Rev,1986,B 33: 2481.
[25] Clark R G,Mallet J R,Haynes S R,Harris J J,Foxon C T. Phys Rev Lett,1988,60: 1747.
[26] Simmons J R,Wei H P,Engel L W,Tsui D C,Shagan M. Phys Rev Lett,1989,63: 1731.
[27] Chang A M,Cunningham J E. Solid State Comm,1989,72: 651.
[28] Wen X G. Phys Rev Lett,1990,64: 2206.
[29] Kane,C L,Fisher M P A. Phys Rev Lett,1994,72: 724.
[30] Saminadayar L,Glaffli D C,Jin Y,Eflienne B. Phys Rev Lett,1997,79: 2526.
[31] dePicciotto R,Reznikov M,Heiblum M,Umansky V,Bunin G,Mahalu D. Nature,1997,389: 162.
[32] Reznikov M,diPicciotto R,Griffth T G,Heiblum M,Umansky V. Nature,1999,399: 238.
[33] Kane C L,Fisher M P A. In: Perspective in Quantum Hall Effects,Das sarma S,Pinczuk A,eds. New York: Wiley-Interscience,1997.
[34] Wen X G. Int J Mod Phys,1991,B5: 1641.
[35] Wen X G. Int J Mod Phys,1992,B6: 1711.
[36] Wen X G. Phys Rev,1990,B 41: 12838.
[37] Yu Y,Zhang W J,Zhu Z Y. Phys Rev,1997,B 56: 13279; Phys Rev Lett,1997,79: 3242.
[38] Haldane F D M. The Hierarchy,Numerical Results. In[4].
[39] Jains J K. Phys Rev Lett,1989,63: 199.
[40] Halperin B I,Lee P A,Read N. Phys Rev,1993,B 47: 7312.
[41] Girvin S,MacDonald A. Phys Rev Lett,1987,58: 1.
[42] Zhang S C,Hansson H,Kivelson S. Phys Rev Lett,1989,62: 82; 1989,62: 980.
[43] Zhang S C. Int J Mod Phys,1992,B 6: 25.
[44] Wilczek F. Anyons,Scientific American. 1991,264(5): 58.
[45] Fradkin E. Field Theories of Condensed Matter Systems. Redwood City: Addison-Wesley,1991.
[46] Kivelson S,Lee D H,Zhang S C. Phys Rev,1992,B 46: 2223.
[47] Kivelson S,Lee D H,Zhang S C. Scientific American,1996,269(3): 86.
[48] Hilke M,Shahar D,Song S-H,Tsui D C,Xie Y H,Monroe D. Nature,1998,395: 675.
[49] Song S-H,Shahar D,Tsui D C,Xie Y H,Monroe D. Phys Rev Lett,1997,78: 2200.
Hilke M,Shahar D,Song S-H,Tsui D C,Xie Y H. Phys Rev,2000,B 62: 6940.
[50] Sheng D N,Weng Z Y. Phys Rev Lett,1997,78: 318; 1998,80: 580.
[51] Sheng D N,Weng Z Y. Phys Rev,2000,B 62: 15363.
[52] Wen X G,Zee A. Nucl Phys,1990,B 15: 135; Zee A,arXiv: cond-mat/9501022.
[53] Fisher M P A,Lee D H. Phys Rev Lett,1989,63: 903; Wen X G,Zee A. Int J Mod Phys,1990,B 4: 437.
[54] de C,Chamon C,et al. Phys Rev,1997,B 55: 2331.
[55] Bishara W,et al. Phys Rev,2009,B 80: 155303.

第10章 Bose-Einstein凝聚

1924年S. Bose将光子作为其数量并不守恒的全同粒子处理而成功地导出了Planck黑体辐射定律，Einstein随即将这个问题推广到全同粒子理想气体，这是Bose-Einstein统计的开始. 1925年Einstein导出了出现凝聚现象的临界温度T_E，以后被称为Bose-Einstein温度. 他对发生凝聚现象有些怀疑，在给Paul Ehrenfest的信中写道："这真是漂亮，但它会是正确的吗?[1]"此后他再也没有提起过这个问题. 直到1938年发现了低温(2.2K以下)液氦的超流现象. F. London指出超流本质上是量子统计现象，并计算出T_E为3.2K之后，Bose-Einstein凝聚(Bose-Einstein condensation，缩写为BEC)才真正引起物理学界的重视. 多年来，已知的Bose-Einstein凝聚体(Bose-Einstein condensates，缩写为BEc，以区别于BEC)有He Ⅱ(氦的超流相)、超导中的Cooper对以及半导体中的激子. 由于实验技术的发展，从20世纪80年代初开始了寻找气态原子BEc的努力. 实验物理学家喻为争夺"圣餐杯"(thė Holy Grail). 终于在1995年获得了^{87}Rb，^{23}Na，^{7}Li气态原子的BEc[2,3,4]. E. Cornell C. Wieman和W. Ketterle获得了2001年Nobel物理奖[73]. 这个成功在物理学界引起相当大的轰动. 实验技术的精妙，所得结果的确切性都是令人印象深刻的. 但毕竟BEC是早已确立的现象，且已有了不少研究成果，为什么气态原子BEc的发现能带来如此的激动呢? 其原因是，在此以前的BEc体系中，或因相互作用太强(He Ⅱ液体中原子间作用力使凝聚高度"贫化")或因环境太复杂，在理论上不易处理. 实验中观察到的现象，哪些是属于BEC的内在原因，哪些只是相互作用的后果，也难以分辨. 气态原子BEc属弱相互作用Bose气体，相互作用在理论上较易处理. 理论和实验可以细致比较，对于理解这一重要现象的本质有很大的好处. 这是自1995年下半年以来，理论和实验研究成果大量涌现的原因.

从Bose气体到Bose-Einstein凝聚是发生了相变. 立即可以提出问题：序参量是什么? 对这个问题以及相应的超导相变序参量问题的答案是非对角长程序中的凝聚体波函数，在10.2节中介绍这个概念. 一个包含宏观量原子的体系能用单粒子波函数描述是建筑在所有粒子波函数的相位相干性之上的，它意味着规范对称性的自发破缺，这一点在10.3节讨论.

Bose-Einstein凝聚体中原子间相互作用是核心问题. 这个问题对均匀凝聚体早在20世纪50年代中期就已解决，其结果在10.4节中介绍. 在实验室中研究的凝聚体是用势捕获的，常用各向异性势，实验研究的理论诠释需要适应这个情况，在10.5，10.6节中讨论这个问题. 最后在10.7节讨论涡旋及其在凝聚体稳定性中所起的作用. 光阱约束的应用使得自旋自

由度进入研究范围. 10.8 节讨论旋量凝聚体. 相对传播的激光束形成光晶格开辟了冷原子气体在光晶格中量子相变的研究，在 10.9 节中予以介绍. Feshbach 共振可以调节原子间相互作用. 它的应用开创了超冷 Fermi 原子气体的 BEC-BCS 跨越等方面的研究，在 10.10 节中介绍.

10.1 Bose-Einstein 凝聚的一些基本关系

在三维空间中，自由理想 Bose 子气体的基态(即零动量态)上布居有限密度 n_0 的粒子，就发生了 BEC：

$$n_0 \equiv \frac{1}{V}\langle a_0^\dagger a_0 \rangle > 0, \tag{10.1.1}$$

以 a_k 代表动量为 $\hbar k$ 的粒子湮灭算符，则 a_0 对应零动量态，V 是总体积，$\langle\rangle$ 指热平均. 对宏观量粒子体系的 BEc 而言，其基态上的粒子数必须是宏观量. 对相互作用 Bose 体系，BEC 仍可由上式定义，在取热平均时要用包括相互作用的 Hamilton 量.

10.1.1 BEC 本质上是量子统计现象

常常会提出问题：用经典统计的 Boltzmann 因子，两个能级 E_1(基态)和 E_2($E_2>E_1$)上粒子布居数之比是：

$$N_2 : N_1 = e^{-(E_2-E_1)/kT}$$

此处 k 为 Boltzmann 常数，在 $kT \ll E_2-E_1$ 时也可以使 $N_1 \gg N_2$，这能否算是发生了凝聚呢？以 He Ⅱ 为例，边长为 1cm 的立方体内用方势阱作简单估计①，基态与第一激发态的能量差为 $\Delta E=2.48\times10^{-30}$erg，相当的 kT 的温度是：T 约为 10^{-14}K. 如果要求 $N_1 \gg N_2$，就需 $T \ll 10^{-14}$K. 液氦的 λ 相变点是 2.18K，可见靠 Boltzmann 因子是不能产生凝聚的. F. London 最早指出液氦 BEC 是量子统计结果，而量子统计必须在粒子数密度 $n>n_Q$(量子浓度)时才会起作用：

$$n_Q = \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}. \tag{10.1.2}$$

质量为 m 的原子的 de Broglie 热波长是

$$\lambda = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}\right)^{1/2}, \tag{10.1.3}$$

因此在 λ^3 体积内有一个原子的体系，其密度就是 n_Q，这正是全同粒子不可区分的条件. 对低温下的液氦这个条件是满足的. 此时 Bose-Einstein 分布给出在温度 T 下能量为 ε 的粒子数热平均值 $N(\varepsilon,T)$ 为：

$$N(\varepsilon,T) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/kT}-1}, \tag{10.1.4}$$

此处 μ 是化学势. 对理想 Bose 气体，在 $n<n_Q$ 时 $\mu=kT\ln\frac{n}{n_Q}$②. 在 $T\to0$ 时，$N(\varepsilon=0)=N$，为总粒子数. 式(10.1.4)给出 $N=-kT/\mu$，即 $\mu=-kT/N$，μ 值为负. 对 $N=10^{22}$，$T=1$K，$\mu\approx$

---

① 可参阅文献[5]p. 201.

② 参阅文献[5]p. 121.

-1.4×10^{-38}erg. 仍以 1cm 边长立方体中液氦为例，基态 $\varepsilon_1=0$，$\varepsilon_1-\mu=1.4\times10^{-38}$erg，第一激发态 ε_2 与 μ 之差为 $\varepsilon_2-\mu\approx\varepsilon_2=2.48\times10^{-30}$erg. 在 $T\approx O(1\text{K})$时，它们都满足 $\varepsilon-\mu\ll kT(k=1.38\times10^{-16}\text{erg}\cdot\text{K}^{-1})$. 此时有

$$N(\varepsilon,T)\approx\frac{kT}{\varepsilon-\mu},$$

即 $N_2:N_1=(\varepsilon_1-\mu):(\varepsilon_2-\mu)\approx O(10^8)$. 可见基态上布居宏观量粒子是由于化学势 μ 非常接近 ε_1 所致，这是量子统计(源于 Bose 子体系波函数的交换对称性)的结果.

10.1.2　Bose-Einstein 温度

令 $N_e(T)$代表在所有激发态上的粒子数，它是温度的函数. 它由 Bose-Einstein 分布和自由粒子的态密度 $\mathscr{D}(\varepsilon)$决定：

$$\mathscr{D}(\varepsilon)=\frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\varepsilon^{1/2},\tag{10.1.5}$$

由此得

$$N_e(T)=\int N(\varepsilon,T)\mathscr{D}(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon.$$

上式中积分下限为第一激发态能量. 在 $|\mu|\ll kT$ 情况下，它可以从式(10.1.4)中略去. 令 $x=\varepsilon/kT$，上式可写作

$$N_e(T)=\frac{V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}(kT)^{3/2}\int_0^\infty\frac{x^{1/2}\mathrm{d}x}{\mathrm{e}^x-1},\tag{10.1.6}$$

由于 $\mathscr{D}(\varepsilon=0)=0$，因此把积分下限设为 0 并不把基态上的粒子包括进来. 积分的值是 $1.036\sqrt{\pi}$①，因此

$$N_e(T)=V2.612n_Q(T),$$

即

$$\frac{N_e(T)}{N}=2.612\frac{n_Q(T)}{n},\tag{10.1.7}$$

此处 n 是体系粒子数密度，$n=\frac{N}{V}$. 将上式右方与 T 的关系写出，有

$$\frac{N_e(T)}{N}=\left(\frac{T}{T_E}\right)^{3/2},\tag{10.1.8}$$

此处

$$T_E=\frac{2\pi\hbar^2}{km}\left(\frac{N}{2.612V}\right)^{2/3}\tag{10.1.9}$$

就是 Bose-Einstein 温度. 从(10.1.7)式看，只有在体系粒子数密度 n 大于 $2.612n_Q$ 时 BEC 才能发生，而要达到这个条件，T 必须小于 T_E. 理想 Bose 气体的 $N_e(T)$ 及 $N_0(T)$(基态上粒子数)与 T 的关系示于图 10.1.

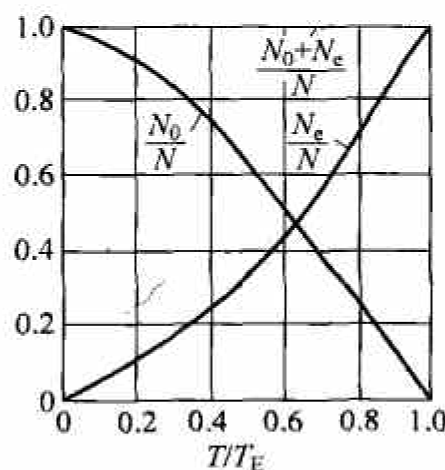


图 10.1　理想 Bose 子气体基态上和激发态上的粒子数与温度的关系

① 参阅文献[5]p. 204.

10.1.3 Bose 气体的热力学性质[5,6]

下面将统计力学中有关公式列出，其中部分公式仅说明出处，不作推导.

体系与温度为 T 的热库平衡时，其位于能量 ε_s 的状态的几率 $\mathscr{D}(\varepsilon_s)$ 与 Boltzmann 因子 $e^{-\beta\varepsilon_s}$ 成正比，此处 $\beta=1/kT$. 因此几率 $\mathscr{P}(\varepsilon)$ 是

$$\mathscr{P}(\varepsilon)=\frac{e^{-\beta\varepsilon}}{Q}, \tag{10.1.10}$$

$Q(T)$ 是正则配分函数，即

$$Q(T)=\sum_s e^{-\beta\varepsilon_s}, \tag{10.1.11}$$

对 s 求和遍及体系所有可能的能量状态. 体系所有的热力学量都通过求热平均决定，例如内能 U 就是

$$U=\frac{\sum_s \varepsilon_s e^{-\beta\varepsilon_s}}{Q}=kT^2\frac{\partial}{\partial T}\ln Q. \tag{10.1.12}$$

体系的 Helmholtz 自由能 $F(V,T)$ 与配分函数的关系是

$$F(V,T)=-\frac{1}{\beta}\ln Q(V,T), \tag{10.1.13}$$

而所有的热力学函数都可以从 $F(V,T)$ 导出：

$$\text{压力}\qquad P=-\frac{\partial F}{\partial V}, \tag{10.1.14}$$

$$\text{熵}\qquad S=-\frac{\partial F}{\partial T}, \tag{10.1.15}$$

$$\text{内能}\qquad U=F+TS, \tag{10.1.16}$$

$$\text{热容量}\qquad C_V=\frac{\partial U}{\partial T}. \tag{10.1.17}$$

当系统和热库之间不仅能交换能量，而且可以交换粒子时，决定体系粒子数为 N、能量为 ε 的几率 $\mathscr{P}(N,\varepsilon)$，由 Gibbs 因子 $e^{\beta(\mu N-\varepsilon)}$ 决定，此处 μ 是化学势，

$$\mu(T,V,N)=\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V}. \tag{10.1.18}$$

它也可以表示为

$$\mu=\left(\frac{\partial U}{\partial N}\right)_{S,V}=-T\left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{U,V}. \tag{10.1.19}$$

当两个体系有热接触及扩散接触（即它们可交换粒子）达到平衡时，双方的化学势相等. 从 Gibbs 因子给出

$$\mathscr{F}(N,\varepsilon)=\frac{e^{\beta(\mu N-\varepsilon)}}{\mathscr{Q}}, \tag{10.1.20}$$

此处巨配分函数 $\mathscr{Q}$ 是

$$\mathscr{Q}(\mu,V,T)=\sum_{N=0}^{\infty}\sum_{S(N)}e^{\beta(N\mu-\varepsilon_s(N))}, \tag{10.1.21}$$

需要明确标出 $\varepsilon_s(N)$ 是 N 个粒子体系的能量本征值. 统计物理中一个重要的量是逸性(fugacity)或称绝对活性(absolute activity)，记作 z：

$$z = e^{\beta\mu}. \tag{10.1.22}$$

对理想气体 $z=n/n_Q$，通过 z，$\mathscr{Q}$ 可以写为

$$\mathscr{Q}(z,V,T) = \sum_{N=0}^{\infty} z^n Q_N(V,T), \tag{10.1.23}$$

此处对正则配分函数 Q 也标明了粒子数. 体系的热力学性质可以从 $\mathscr{Q}$ 导出，例如考虑到 $\frac{\partial}{\partial\mu}=\frac{\partial z}{\partial\mu}\frac{\partial}{\partial z}=\beta z\frac{\partial}{\partial z}$，平均粒子数是

$$\langle N\rangle = \frac{\sum\limits_{N}\sum\limits_{s(N)} N e^{\beta(N\mu-\varepsilon_s(N))}}{\mathscr{Q}} = \frac{kT}{\mathscr{Q}}\frac{\partial\mathscr{Q}}{\partial\mu} = z\frac{\partial}{\partial z}\ln\mathscr{Q}. \tag{10.1.24}$$

从此可以得到体系的状态方程. 定义比体积 $v=V/N$(一个粒子所占据的体积)，从式(10.1.24)可得

$$\frac{1}{v} = \frac{\langle N\rangle}{V} = z\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{V}\ln\mathscr{Q}\right). \tag{10.1.25}$$

此外，从统计力学巨正则系综描述，有①

$$\frac{PV}{kT} = \ln\mathscr{Q}(z,V,T) \tag{10.1.26}$$

式(10.1.25)、式(10.1.26)是状态方程的含参数 z 的形式. 理想 Bose 子气体的巨配分函数是

$$\mathscr{Q} = \frac{1}{1-ze^{-\beta\varepsilon}}, \tag{10.1.27}$$

将式(10.1.27)代入式(10.1.24)得出

$$\langle N\rangle = \frac{1}{\frac{1}{z}e^{\beta\varepsilon}-1} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1},$$

正是 Bose-Einstein 分布函数. 通过鞍点积分可以建立一个重要关系②：

$$\frac{1}{V}\ln Q_N = \frac{1}{V}\ln\mathscr{Q}(z) - \frac{1}{v}\ln z. \tag{10.1.28}$$

对自由 Bose 子，能量决定于动量 p：

$$\varepsilon_p = \frac{1}{2m}p^2$$

在 $\varepsilon=0$ 态上的粒子数是

$$\langle N_0\rangle = \frac{z}{1-z}. \tag{10.1.29}$$

由于 $N_0\geqslant 0$，有 $0\leqslant z\leqslant 1$. 考虑到 $z=e^{\beta\mu}$，这与 10.1.1 节给出的 μ 为负值是相对应的. 理想 Bose 气体在低温下 $\beta\mu=-\frac{1}{N}$，即在热力学极限下，$T\to 0$ 时 $z\to 1$. 将 p 作为连续变量，半经典近似给出 $\sum\limits_s \to \frac{1}{h^3}V\int d^3p$，式(10.1.26)导致

$$\frac{P}{kT} = \frac{1}{V}\ln\mathscr{Q} = \frac{4\pi}{h^3}\int_0^{\infty} dp\, p^2\ln(1-ze^{-\beta p^2/2m}) - \frac{1}{V}\ln(1-z), \tag{10.1.30}$$

---

① 参阅文献[6]关于巨正则系综一节.

② 参阅文献[7]p. 6～7.

由于动量空间体积元在 $p=0$ 处为 0，应将 $\mathscr{Q}$ 在 $p=0$ 处的贡献单独分出，它是 $\mathscr{Q}\to\frac{1}{1-z}$，这就是上式的第二项. 第一项中积分可归结为

$$g_{5/2}(z)\equiv-\frac{4}{\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^2\ln(1-z\mathrm{e}^{-x^2})=\sum_{l=1}^{\infty}\frac{z^l}{l^{5/2}}, \tag{10.1.31}$$

即

$$\frac{P}{kT}=\frac{1}{\lambda^3}g_{5/2}(z)-\frac{1}{V}\ln(1-z), \tag{10.1.32}$$

此处 λ 是 de Broglie 热波长 $\lambda=\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}\right)^{1/2}$. 定义

$$g_{3/2}(z)\equiv z\frac{\partial}{\partial z}g_{5/2}(z)\equiv\sum_{l=1}^{\infty}\frac{z^l}{l^{3/2}}, \tag{10.1.33}$$

式(10.1.25)给出

$$\frac{1}{v}=\frac{1}{\lambda^3}g_{3/2}(z)+\frac{1}{V}\frac{z}{1-z}. \tag{10.1.34}$$

参数化状态方程式(10.1.32)和式(10.1.34)的特点是，方程右方第一项来自所有 $p\neq0$ 的状态，而第二项来自 $p=0$ 态. 在热力学极限下 $V\to\infty$，第二项只有在 $z=1$ 时它的贡献才不为零. 从式(10.1.34)可以得出 BEC 发生的临界条件. 函数 $g_{3/2}(z)$ 示于图 10.2，在 $z=1$ 时它的导数发散，但它本身的值是有限的，为 2.612，即

$$g_{3/2}(1)=\sum_{l=1}^{\infty}\frac{1}{l^{3/2}}=2.612. \tag{10.1.35}$$

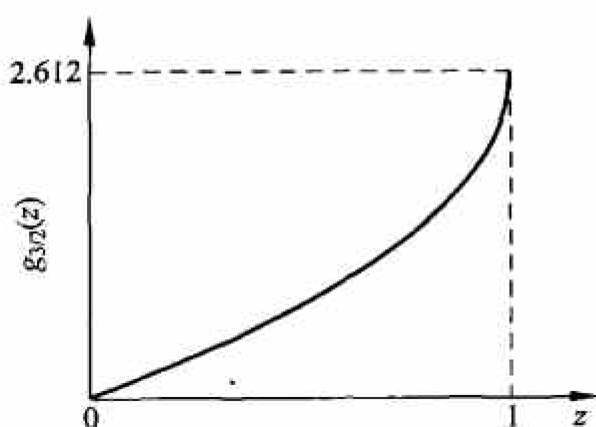


图 10.2 函数 $g_{3/2}(z)$

结合式(10.1.29)，式(10.1.34)可改写为

$$\lambda^3\frac{\langle N_0\rangle}{V}=\frac{\lambda^3}{v}-g_{3/2}(z). \tag{10.1.36}$$

它意味着当温度与比体积满足条件

$$\frac{\lambda^3}{v}>g_{3/2}(1) \tag{10.1.37}$$

时，$\langle N_0\rangle/V$ 才不为 0. 这是 BEC 的条件：占粒子总数的一定比例的、宏观量的粒子集中于 $\boldsymbol{p}=0$ 一个能级之上. 对给定的比体积 v，式(10.1.37)的临界条件为

$$\frac{\lambda_c^3}{v}=g_{3/2}(1), \tag{10.1.38}$$

给出 λ 的临界值 $\lambda_c=[vg_{3/2}(1)]^{1/3}$，它相应临界温度 T_E：

$$T_E=\frac{2\pi\hbar^2}{mk[vg_{3/2}(1)]^{2/3}}, \tag{10.1.39}$$

即 Bose-Einstein 温度(式(10.1.9)). 相应给定的 T，式(10.1.38)给出临界比体积 v_c，

$$v_c=\frac{\lambda^3}{g_{3/2}(1)}=\frac{1}{g_{3/2}(1)}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}\right)^{3/2}. \tag{10.1.40}$$

为了进一步讨论状态方程的性质，先要解出作为 v 与 T 函数的 $z(v,T)$. 方程(10.1.34)对 z

的求解,用图解法是简明的(图 10.3(a)).对于大而有限的 V,图解法给出图 10.3(b)的 z 作为 v/λ^3 的函数.在 $V\to\infty$ 极限下,有

$$z=\begin{cases}1, & \text{当}\dfrac{\lambda^3}{v}\geqslant g_{3/2}(1);\\ \text{方程 } g_{3/2}(z)=\dfrac{\lambda^3}{v}\text{ 的根}, & \text{当}\dfrac{\lambda^3}{v}\leqslant g_{3/2}(1).\end{cases} \tag{10.1.41}$$

结果示于图 10.3(c).式(10.1.36)可改写为

$$\frac{\langle N_0\rangle}{N}=1-\frac{v}{\lambda^3}g_{3/2}(z).$$

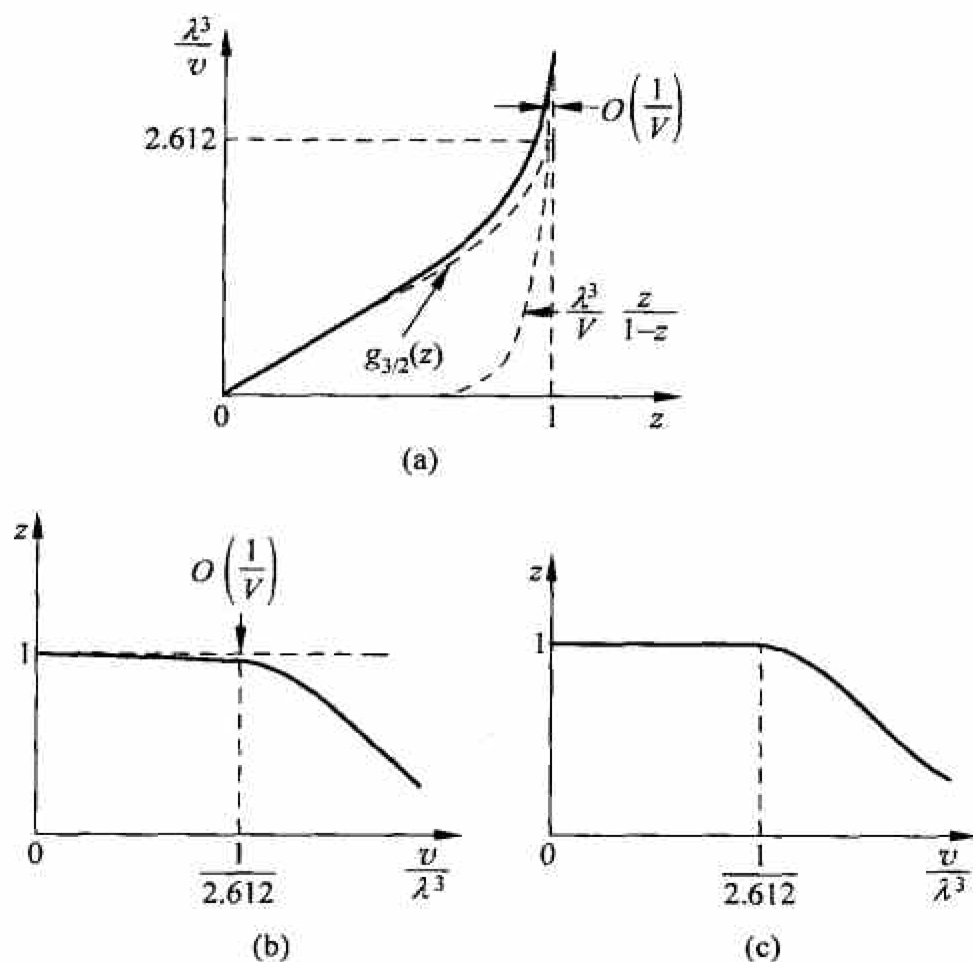


图 10.3 Bose 气体的逸性

(a) 方程(10.1.34)的图解;(b) 理想 Bose 气体的逸性;(c) 体积 $V\to\infty$ 下的逸性

从解 z[式(10.1.41)]可见,在基态上的粒子数与粒子总数之比为

$$\frac{\langle N_0\rangle}{N}=\begin{cases}0, & \text{当}\dfrac{\lambda^3}{v}\leqslant g_{3/2}(1);\\ 1-\left(\dfrac{T}{T_{\mathrm{E}}}\right)^{3/2}=1-\dfrac{v}{v_{\mathrm{c}}}, & \text{当}\dfrac{\lambda^3}{v}\geqslant g_{3/2}(1).\end{cases} \tag{10.1.42}$$

在 $T>T_{\mathrm{E}}$ 或 $v<v_{\mathrm{c}}$ 时,在宏观量 N 粒子中布居于基态的比例为 0,只在 $T<T_{\mathrm{E}}$ 或 $v>v_{\mathrm{c}}$ 时才有有限比例的粒子处于基态.在 $T\to 0$ 时这个比例趋近于 1.

状态方程(10.1.32)中的第二项 $-\dfrac{1}{V}\ln(1-z)$ 是来自基态的贡献.在 $T>T_{\mathrm{E}}$ 时,$z<1$,当 $V\to\infty$ 时它的贡献为 0.在 $T<T_{\mathrm{E}}$ 时,z 与 1 的差别是 $O\left(\dfrac{1}{V}\right)$.这一项是 $\dfrac{1}{V}(\ln V+\text{const})$,在 $V\to\infty$ 时它的贡献也为 0.因此有

$$\frac{P}{kT}=\begin{cases}\frac{1}{\lambda^3}g_{5/2}(z), & \text{当 } v>v_c;\\ \frac{1}{\lambda^3}g_{5/2}(1), & \text{当 } v<v_c.\end{cases} \tag{10.1.43}$$

基态上的粒子，不论是否发生 BEC，对压力都没有贡献. 当 v 减小(但仍大于 v_c)时，z 随之增大，P 也因 $g_{5/2}(z)$ 增大. 当 v 从 v_c 开始再进一步减小时 P 即与 v 无关($g_{5/2}(1)=1.342\cdots$). 图 10.4 给出理想 Bose 气体的两条等温线. 越过临界点之后，P 不再变化的行为是气体相($p\neq 0$)和凝聚相($p=0$)共存的表现. 这和气液相变极为相似. 从式(10.1.42)也可以看出，$T\to 0$ 时，$\frac{\langle N_0\rangle}{N}\to 1$，即 $v\to 0$. 气相具有有限的比体积，而凝聚相的比体积为 0. 在临界点，有

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}T}=\frac{5}{2}\frac{kg_{5/2}(1)}{\lambda^2}=\frac{L}{T\Delta v}. \tag{10.1.44}$$

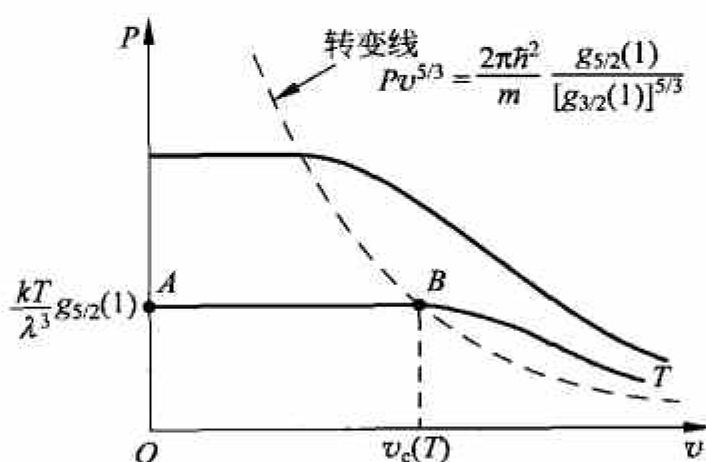


图 10.4 理想 Bose 气体的等温线

第二个等号是基于 Clapeyron 方程，$\Delta v=v_c-0=v_c$ 是两相比体积之差，L 是每个粒子的潜热：

$$L=\frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)}\frac{5}{2}kT. \tag{10.1.45}$$

因此，理想 Bose 气体的 BEC 是一阶相变，这个结论对理想 Bose 气体适用，在相互作用足够强时它会失败. 例如 He Ⅱ 的 λ 相变并没有潜热. 在文献中常将 BEC 描述为"动量空间的凝聚". 这个提法只强调 BEC 发生的原因是在于波函数的对称性而不取决于粒子间相互作用，但不能把它理解为凝聚仅在动量空间发生. 如果将理想 Bose 气体置于引力场中，则在发生凝聚时会和气液相变一样发生两个相的空间分离. 这一点是由 W. Lamb 和 A. Nordsieck 在 1941 年指出的[8].

体系的内能是

$$\frac{U}{N}=\frac{3}{2}Pv=\begin{cases}\frac{3}{2}\frac{kTv}{\lambda^3}g_{5/2}(z), & \text{当 } v>v_c;\\ \frac{3}{2}\frac{kTv}{\lambda^3}g_{5/2}(1), & \text{当 } v<v_c.\end{cases} \tag{10.1.46}$$

下面计算体系的熵. 对开放体系，势力学势 $G(T,V,\mu)$ 与 P,S 关系是

$$P=-\left.\frac{\partial G}{\partial V}\right|_T,\quad S=-\left.\frac{\partial G}{\partial T}\right|_V.$$

考虑 $T>T_E$ 情况. 取热力学极限，

$$P = \lim\left(-\frac{G(T,V,\mu)}{V}\right) = \frac{kT}{\lambda^3} g_{5/2}(z).$$

体系单位体积的熵是

$$\lim \frac{\langle S \rangle}{T} = \lim\left(-\frac{1}{V}\frac{\partial G}{\partial T}\bigg|_{V,\mu}\right) = \frac{\partial}{\partial T}\frac{kT}{\lambda^3} g_{5/2}(z).$$

由于

$$\frac{T}{\lambda^3} = T\left(\frac{2\pi \hbar^2}{mkT}\right)^{-3/2} = T^{5/2}\left(\frac{2\pi \hbar^2}{mk}\right)^{-3/2},$$

$$z\frac{\partial}{\partial z} g_{5/2}(z) = g_{3/2}(z) = \frac{\lambda^3 \langle N \rangle}{V},$$

可得

$$\lim \frac{\langle S \rangle}{V} = \frac{5}{2}\frac{k}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \frac{k\langle N \rangle}{V}\ln z.$$

故有

$$\frac{S}{Nk} = \begin{cases} \dfrac{5}{2}\dfrac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \ln z, & 当\ v > v_c; \\ \dfrac{5}{2}\dfrac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(1), & 当\ v < v_c. \end{cases} \tag{10.1.47}$$

$T \to 0$ 时，$z \to 1$，$v \to 0$，因此 $S=0$，符合热力学第三定律. 气体相占粒子总数的份额为 $\frac{v}{v_c}$，凝聚相粒子熵为 0. 在临界点以下每个粒子的熵是

$$\frac{S}{N} = \frac{v}{v_c}s = \left(\frac{T}{T_E}\right)^{3/2} s,$$

此处 s 是气体相每个粒子的熵. 在临界点处

$$\frac{S}{N} = \frac{5}{2}k\frac{v_c}{\lambda^3} g_{5/2}(1),$$

即

$$s = \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)}\frac{5}{2}k. \tag{10.1.48}$$

因此相变潜热为

$$L = T\Delta s = Ts = \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)}\frac{5}{2}kT,$$

与式(10.1.45)相同.

10.2 Bose-Einstein 凝聚的序参量与非对角长程序

O. Penrose 和 L. Onsager[9,10] 首先提出在相互作用 Bose 子体系中 BEC 的出现是以非对角长程序的存在表征的. 为了给出相互作用 Bose 子和 Fermi 子体系中产生 BEC 的普遍判据，杨振宁对此进行了系统研究[11]. 考虑具有平移不变性的多粒子体系，其“单粒子密度矩阵”定义为

$$\rho_1(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \langle \psi^\dagger(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{y}) \rangle = \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}} e^{-i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{y})} \langle a_{\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{q}} \rangle, \tag{10.2.1}$$

此处二次量子化的粒子场算符 ψ 是用平面波模式展开的，a_q 是波矢为 $\boldsymbol{q}$（动量 $\hbar\boldsymbol{q}$）粒子的湮灭算符，$\langle\ \rangle$ 是系综平均（热平均）. 单粒子密度矩阵也是一个关联函数：在 $\boldsymbol{y}$ 消灭一个粒子与在 $\boldsymbol{x}$ 产生一个粒子间的关联. 总动量算符 $\boldsymbol{P}$ 是

$$\boldsymbol{P} = \sum \boldsymbol{p} a_p^\dagger a_p. \tag{10.2.2}$$

由于体系是平移不变的，应有

$$[\boldsymbol{P}, H] = 0. \tag{10.2.3}$$

考虑

$$\begin{aligned}\langle[\boldsymbol{P}, a_p^\dagger a_q]\rangle &= \frac{\mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\beta H}\boldsymbol{P} a_p^\dagger a_q - \mathrm{e}^{-\beta H} a_p^\dagger a_q \boldsymbol{P})}{\mathrm{tr}\ \mathrm{e}^{-\beta H}} \\ &= \frac{\mathrm{tr}([\mathrm{e}^{-\beta H}, \boldsymbol{P}] a_p^\dagger a_q)}{\mathrm{tr}\ \mathrm{e}^{-\beta H}} = 0,\end{aligned}$$

此处第二个等号采用 $\mathrm{tr}ABC = \mathrm{tr}\ CAB$ 重写了分子的第二项，第三个等号采用了式(10.2.3). 此外，直接计算给出

$$[\boldsymbol{P}, a_p^\dagger a_q] = (\boldsymbol{P} - \boldsymbol{q}) a_p^\dagger a_q,$$

因此，

$$\langle a_p^\dagger a_q \rangle = \delta_{pq} \langle N_p \rangle, \tag{10.2.4}$$

此处

$$N_p = a_p^\dagger a_p.$$

代回式(10.2.1)，有

$$\begin{aligned}\rho_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) &= \frac{1}{V}\sum_p \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}\langle N_p\rangle \\ &= \frac{\langle N_0\rangle}{V} + \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi)^3}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}\langle N_p\rangle.\end{aligned} \tag{10.2.5}$$

以上将求和中 $\boldsymbol{p}=0$ 一项分出，并将 $\boldsymbol{p}\neq 0$ 部分作为连续变量 $\boldsymbol{p}$ 的积分处理. 形式上这也包括 $\boldsymbol{p}=0$ 态，但积分的变量元 $\mathrm{d}^3 p$ 中的 $\boldsymbol{p}^2$ 因子自动去掉了 $\boldsymbol{p}=0$ 态. 上式在 $|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\to\infty$ 时，第二项趋于 0. 这可以从定性论据判断(在 $|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\to\infty$ 时，指数因子急剧振荡等)，并且存在严格证明[1]. 因此，

$$\rho_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \xrightarrow{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\to\infty} \frac{\langle N_0\rangle}{V}. \tag{10.2.6}$$

在推导式(10.2.6)时并未具体规定多体系统的统计性质. 因此，对 Fermi 子以及在 $T>T_{\mathrm{E}}$ 条件下的 Bose 子，在热力学极限下其 $\rho_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \xrightarrow{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\to\infty} 0$，而只有对 $T<T_{\mathrm{E}}$ 的 Bose 子体系 $\rho_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ 在极限下才不为 0. 式(10.2.6)并不意味着体系存在长程关联，它只说明体系在 $\boldsymbol{p}=0$ 态上粒子数密度为有限值. 条件(10.2.6)式称为非对角长程序[2]. 作为 BEC 存在的判据，其重要意义在于：对相互作用体系，单粒子动量已不是好量子数，$N_0 = a_0^\dagger a_0$ 也和 H 不对易. 但作为系综平均值 $\langle N_0\rangle/V$ 的不为 0 仍可作为 BEC 存在的表征. 在 20 世纪 50 年代 Penrose 和 Onsager 建议，BEC 存在的特征是

---

① 参阅文献[7]p. 304.

② 命名的解释见式(10.56)下面的一段.

$$\langle \psi^{\dagger}(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{y})\rangle \longrightarrow f^{*}(\boldsymbol{x})f(\boldsymbol{y}),$$

即在 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ 两点用同一函数 f 表征，不论 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ 相距多远. f 只与定域的动力学变量有关. 他们认为 $f(x)$ 是 BEC 的序参量，当前普遍接受的选择是

$$\langle \psi^{\dagger}(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{y})\rangle \xrightarrow{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\to\infty} \langle \psi^{\dagger}(\boldsymbol{x})\rangle\langle \psi(\boldsymbol{y})\rangle. \tag{10.2.7}$$

复函数 $\langle\psi(\boldsymbol{x})\rangle$ 有幅和相位，它就是"凝聚体波函数"，是 BEC 的序参量. 对相互作用 Fermi 子体系，文献[11]中证明，存在 BEC 的判据是二粒子密度矩阵 $\langle \psi^{\dagger}(\boldsymbol{x}'_1)\psi^{\dagger}(\boldsymbol{x}'_2)\psi(\boldsymbol{x}_1)\psi(\boldsymbol{x}_2)\rangle$ 存在非对角长程序：

$$\langle \psi^{\dagger}(\boldsymbol{x}'_1)\psi^{\dagger}(\boldsymbol{x}'_2)\psi(\boldsymbol{x}_1)\psi(\boldsymbol{x}_2)\rangle \xrightarrow[\boldsymbol{x}_1\approx\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}'_1\approx\boldsymbol{x}'_2]{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}'_1|\to\infty} \varphi^{*}(\boldsymbol{x}'_1,\boldsymbol{x}'_2)\varphi(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)\neq 0 \tag{10.2.8}$$

式中符号"≈"代表两个位置的距离是微观的. 和式(10.2.6)类似，式(10.2.8)并不代表体系存在 $\boldsymbol{x}_1$ 与 $\boldsymbol{x}'_1$(相距甚远)的长程关联，而仅意味着体系中如果发生 Cooper 对的 BEC，则在 $\boldsymbol{x}_1$ 处和 $\boldsymbol{x}'_1$ 处的对都由同一个波函数 φ 描述. 之所以称为"非对角"，是因为式(10.2.6)是 ρ_1 的非对角元 $\langle\boldsymbol{x}|\rho_1|\boldsymbol{y}\rangle$，式(10.2.8)是 ρ_2 的非对角元 $\langle\boldsymbol{x}'_1\boldsymbol{x}'_2|\rho_2|\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_2\rangle$. 固体的长程序是可以用经典力学语言描述的. 在量子力学中，它相当于 ρ_2 的对角元 $\langle\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_2|\rho_2|\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_2\rangle$ 的性质. 非对角长程序没有经典的对应，是纯粹量子力学的性质. 重要的是，自由 Fermi 子体系的单粒子密度矩阵和二粒子密度矩阵都没有非对角长程序，只有在一对 Fermi 子结合成 Cooper 对而大量的对占据一个单粒子能级时才会有非对角长程序.

作为 BEc 存在的判据，非对角长程序应该能导致凝聚体的其他基本性质. 事实确实如此：在超导中 ρ_2 的非对角长程序导致 Meissner 效应和磁通量子化. 这是 G. L. Sewell[13] 以及聂华桐、苏刚和赵保恒[14]证明的. 对超流体，ρ_1 的非对角长程序在单联通区域导致无旋流，在多联通区域导致环流量子化①，这是苏刚和铃木增雄[15]所证明的. 在文献[14]和文献[15]的证明中相关的现象有一个共同的根源，即凝聚体波函数的相位相干性.

10.3 Bose-Einstein 凝聚的本质：对称自发破缺和相位相干性

和 BEC 本质相关的有一对联系密切的重要概念，一是"对称自发破缺"，一是"相位相干". 先讨论对称自发破缺②. BEC 的序参量 $\langle\psi(\boldsymbol{x})\rangle$ 是场算符的系综平均值，即

$$\langle\psi(\boldsymbol{x})\rangle = \frac{\mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\psi(\boldsymbol{x}))}{\mathrm{tr}\ \mathrm{e}^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}}, \tag{10.3.1}$$

分子也可以形式地写作 $\sum_s\langle s\mid\psi(\boldsymbol{x})\mid s\rangle$，此处 s 是巨正则 Hamilton 量 $\hat{H}-\mu\hat{N}$ 的本征态，$\sum_s$ 对所有本征态求和. $\psi(\boldsymbol{x})$ 是粒子湮灭算符，对 $\hat{N}$ 的本征态，它的期待值应是 0. 但此处用的是 $\hat{H}-\mu\hat{N}$ 的本征态，并不要求它必须是 $\hat{N}$ 的本征态. 在无限大体积极限下 $\hat{H}-\mu\hat{N}$ 是高度简并的，完全可以取不同粒子数、不同能量的态组成 $\hat{H}-\mu\hat{N}$ 的本征态集合. 因此，$\langle\psi(\boldsymbol{x})\rangle$ 可

---

① 参见式(9.5.36)，式(10.3.8)和式(10.3.9)

② 这个讨论基于文献[6]p. 300～302.

以不为 0，这样议论看来好像能够成立. 但从另一角度考虑，计算式(10.3.1)分子上的迹，可以取任意的基. 我们完全可以取一组具有确定粒子数的基来进行计算，这样 $\langle\psi(\boldsymbol{x})\rangle$ 就必须为 0. 这一点反映了一个深刻的原理：Hamilton 量具有整体规范不变性，即在变换

$$\psi(\boldsymbol{x}) \longrightarrow e^{i\alpha}\psi(\boldsymbol{x}) \tag{10.3.2}$$

下的不变性，此处 α 是任意实常数. 这个不变性是与粒子数守恒相对应的. 在取系综平均时，每一个 $\psi=re^{i\theta}$ 总会有一个 $\psi=re^{i(\theta+\pi)}$ 和它相抵消. 这一点和磁学中的 van Leuven 定理是完全类似的. 在计算铁磁体的自发磁化 $\boldsymbol{M}$ 时，要取系综平均

$$\langle \boldsymbol{M}\rangle = \frac{\mathrm{tr}(e^{-\beta\hat{H}}\boldsymbol{M})}{\mathrm{tr}\ e^{-\beta\hat{H}}}. \tag{10.3.3}$$

由于在无外磁场存在时，$\hat{H}$ 对 $\boldsymbol{M}\to-\boldsymbol{M}$ 变换是不变的，因此有一个 $\boldsymbol{M}$ 就有一个等几率的 $-\boldsymbol{M}$ 和它对消，即自发磁化为 0. 这显然和在 Curie 温度 T_c 下铁磁体存在自发磁化这一概念相抵触.

解决这个佯谬的关键是对称自发破缺[①]，即体系的基态不具有体系 Hamilton 量的某个对称性. 这只在最低能量态是简并的情况下才会发生：体系的对称性体现在简并态中任何一个态都可以成为物理上的基态. 如铁磁体，它的基态不具有体系的空间旋转不变性，因为 $\boldsymbol{M}$ 总要选定空间的一个方向. 选定某个方向或选另一个方向在能量上是一样的. 从一个方向跃迁到另一个方向是不需要能量的，但这需要所有的原子磁矩一齐转向. 如果体系有少数几个原子，出现这种情况的几率还不算太小. 但如果体系是宏观的，就需要等到 Poincaré 循环量级的巨大的长时间. 统计力学的系综平均只在弛豫时间有限时才有意义. 因此在作系综平均时，$\boldsymbol{M}$ 与 $-\boldsymbol{M}$ 出现就不可能是等几率的. 办法是：引入一个外磁场 $\boldsymbol{B}$，其方向和最终的自发磁化方向一致，然后进行平均，平均之后再将磁场去掉，此时单位体积内的磁化强度为

$$\frac{\langle \boldsymbol{M}\rangle}{V} \equiv \lim_{|\boldsymbol{B}|\to 0}\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\frac{\mathrm{tr}\ e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N}-\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{B})}\boldsymbol{M}}{\mathrm{tr}\ e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N}-\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{B})}}. \tag{10.3.4}$$

这个办法可以借到 BEC 来. 可以引入虚拟的 c 数外源 $\eta(\boldsymbol{x})$，使巨正则 Hamilton 量变成 ψ 与 η 的泛函：

$$\hat{\mathscr{E}}[\psi,\eta] = \hat{H} - \mu\hat{N} - \int d^3x[\psi(\boldsymbol{x})\eta(\boldsymbol{x}) + \psi^\dagger(\boldsymbol{x})\eta^*(\boldsymbol{x})], \tag{10.3.5}$$

取过平均之后再令 $\eta\to 0$，则

$$\langle\psi(\boldsymbol{x})\rangle \equiv \lim_{\eta\to 0}\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\frac{\mathrm{tr}[e^{-\beta\hat{\mathscr{E}}[\psi,\eta]}\psi(\boldsymbol{x})]}{\mathrm{tr}\ e^{-\beta\hat{\mathscr{E}}[\psi,\eta]}}. \tag{10.3.6}$$

平均值式(10.3.4)、式(10.3.6)如果将取极限的次序颠倒就得到 0，这反映了体系本身的对称性. 不为 0 的序参量有其相位，即真空态和相位有关. 但体系的 Hamilton 量并不依赖 ψ 的相位. 存在不为 0 的序参量(BEc 波函数)，即意味着对称的自发破缺.

---

① 请参阅本书第 7 章 7.2 节.

A. Leggett[16-18]不同意用整体相位的对称性自发破缺. 他认为叠加 $\Psi=\sum_N a_N\psi_N$ ①根本不是体系的正确描述,并认为把 $\langle\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle$ 作为序参量来定义会导致不必要的问题,最好不用它. Leggett 的序参量定义是 $\psi(\boldsymbol{r},t)=\sqrt{N_0(t)}\chi_0(\boldsymbol{r},t)$,此处 χ_0 是凝聚发生的单粒子态.

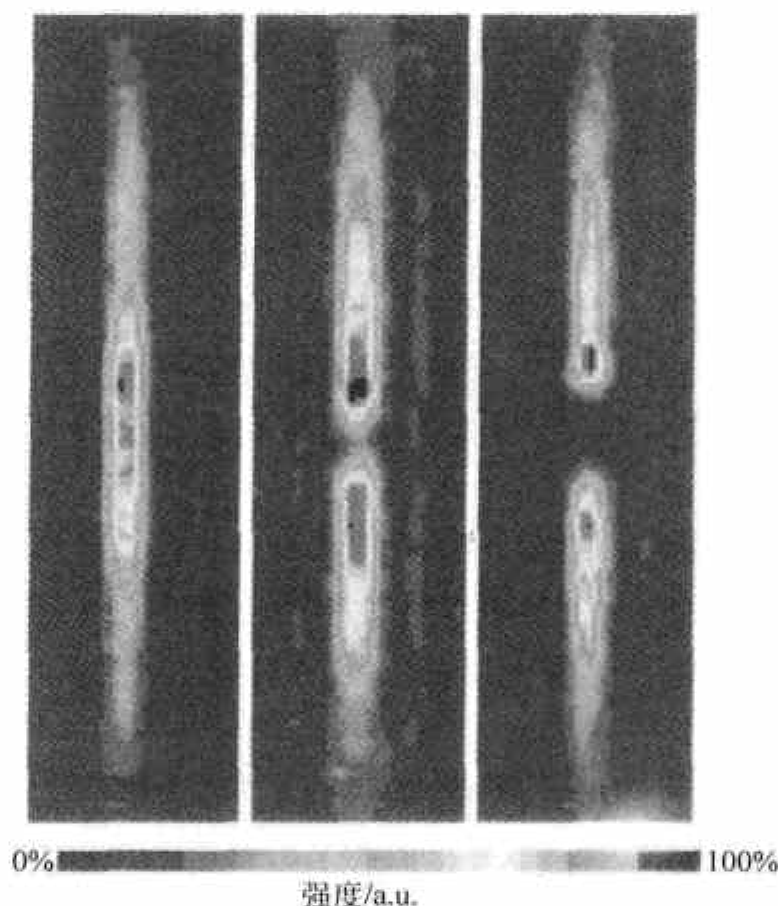


图 10.5 磁-光阱内凝聚体被激光一分为二,激光参数不同可使两团 BEC 距离不同(中下图). 取自[22]

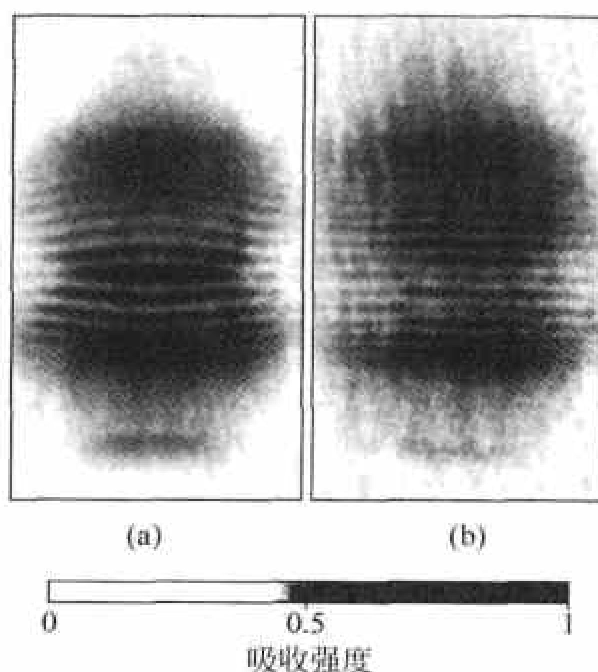


图 10.6 两团凝聚体的干涉条纹. 取自[22]
(a) 两团原始距离为 32μm; (b) 两团原始距离为 35μm

另一个概念是相位相干. 序参量可以写作

$$\langle\psi(\boldsymbol{x})\rangle=f(\boldsymbol{x})e^{i\theta(\boldsymbol{x})},\tag{10.3.7}$$

其中幅 $f(\boldsymbol{x})$ 是 BEc 数密度的平方根. 相位 $\theta(\boldsymbol{x})$ 的意义需要进一步探讨. 作为 BEc 的波函数,它是宏观的. 不仅指 BEc 包括宏观量的粒子,且 $\boldsymbol{x}$ 所延伸的距离也是宏观的. 和多体系统的一般波函数不同,它不是 N 个坐标的函数 $\Psi(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N)$,而是用一个坐标描述的函数. 相位有其任意性,例如在 $\langle\psi(\boldsymbol{x})\rangle$ 上乘以相因子 $e^{i\alpha}$(α 为任意实常数)不带来任何物理差别. 但这里重要的是 $\theta(\boldsymbol{x}_1)$ 和 $\theta(\boldsymbol{x}_2)$ 是互相关联的. 不论 $|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|$ 有多大,只要这两点都在体系内,则两个相位的相对值是固定的. P. W. Anderson[19]举例说明了这一点. 设想将体系分为同样体积的 K 个宏观盒子. 每盒内在 $\boldsymbol{k}=0$ 态上有 N_0/K 个粒子. 令 A_i 为在第 i 个盒内消灭一个 $\boldsymbol{k}=0$ 态粒子的算符. 因此有

$$a_0=\frac{1}{\sqrt{K}}\sum_i A_i,$$

$$\langle a_0^\dagger a_0\rangle=N_0,$$

① 这是一个相干叠加. 相干态就是这种叠加的一个例子. 不同粒子数状态构成的巨正则系综是统计混合,各态间没有相位相干性.

$$\langle A_i^\dagger A_i \rangle = \frac{N_0}{K}.$$

将第一式代入第二式，就有

$$\langle a_0^\dagger a_0 \rangle = \frac{1}{K}\sum_{i,j}\langle A_i^\dagger A_j \rangle = \frac{1}{K}\sum_{i}\langle A_i^\dagger A_i \rangle + \frac{1}{K}\sum_{i\neq j}\langle A_i^\dagger A_j \rangle$$
$$= \frac{N_0}{K} + \frac{1}{K}\sum_{i\neq j}\langle A_i^\dagger A_j \rangle.$$

对很大的 K，第二项是为主的，因此在不同的盒子内相位必须是相干的. 式(10.3.7)已在本书第 6 章 6.1 节中出现过，式(6.1.4)给出超流体速度与相位梯度的关系

$$\boldsymbol{v}_s = \frac{\hbar}{m}\nabla\theta. \tag{10.3.8}$$

从流体中某一点出发作 $\boldsymbol{v}_s$ 的封闭线积分

$$\oint \boldsymbol{v}_s \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s} = \frac{\hbar}{m}\oint \nabla\theta \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s}$$

右方积分正是经过封闭曲线绕一周后回到原地相位的变化. 同于波函数的单值性，θ 的变化只能是 2π 的整数倍. 因此

$$\oint \boldsymbol{v}_s \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s} = \frac{2\pi\hbar}{m}\kappa, \quad \kappa = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots. \tag{10.3.9}$$

这是 Onsager-Feynman 涡旋量子化条件，在后面讨论 BEc 稳定性时将会有应用.

在本书第 6 章介绍过 Ginzburg-Landau 提出了复序参量场，研究的背景是超导. 上面提到的 Penrose-Onsager 序参量场，研究的对象是超流. 杨振宁的非对角长程序给出严格、统一的描述. 在 BEc 波函数(10.3.7)式中 $\theta(\boldsymbol{x})$ 是确定的函数(准到一个加性常数)，这称为相位锁定态. 和它平行的是粒子数锁定态，即 BEc 有确定粒子数的态，记为 $\psi(N)$. 从 $\psi(N)$ 可以构成相位锁定态：

$$\psi(\theta) = \sum_N c_N \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta N}\psi(N), \tag{10.3.10}$$

其中 c_N 在平均值 N_0 处有峰值，它容许 N 值有适当涨落①. 计算波场 $\hat{\psi}$ 对 $\psi(\theta)$ 态的期望值：

$$\langle\hat{\psi}\rangle = (\psi(\theta), \hat{\psi}\psi(\theta)).$$

由于 $\hat{\psi}$ 是粒子湮灭算符，在标量积左方的展开中 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta(N-1)}$ 和右方的 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta N}$ 相联系，故有

$$\langle\hat{\psi}\rangle = f\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta},$$

正是所需要的，因此构成式(10.3.10)是正确的. 算符 N 和 θ 是共轭的，即

$$N = \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\theta} \quad 或 \quad \theta = -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial N}. \tag{10.3.11}$$

在量子力学中，量子相位算符是一个有着一段深刻争议历史的问题. 问题在于 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$ 作为算符不是幺正的，即 θ 是非厄密的. 此外，不确定关系 $\Delta N\Delta\theta \geqslant \frac{1}{2}$ 也会遇到矛盾. 因为相位 $|\Delta\theta|$ 最大的值是 π. 如果要求 ΔN 很小，就会破坏不确定关系[20]. 这些问题在本书第 13 章中还有系

① 相干态常被用来描述 BEc：$\langle z\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|z|^2}\sum_n \frac{1}{\sqrt{n!}}z^n|n\rangle$，此处 $z=|z|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$ 是复数，$|n\rangle$ 是粒子数确定的 Fock 态. 它是(10.3.10) 的一个特例.

统论述. 以上所提到的矛盾在微观体系中会变得尖锐. 对本章讨论的问题, N 是宏观量, 其涨落也是宏观量, 因此还是可以用$[N,\theta]=\mathrm{i}$以及算符式(10.3.11). 例如 N 和 θ 的运动方程会给出 Ginzburg-Landau 超电流(supercurrent)方程和 London 方程[19,21]. 在评述有关超流体的理论工作时, P. W. Anderson 指出①, 过去人们研究这个问题总是要加上一条本不需要的假定, 即粒子数必须固定, 徒然增加了很多困难. 实际上这个问题可以用非对角长程序成功地处理. BEc 的相位相干性在实验中已得到证实[22]. W. Ketterle 研究组在磁-光阱中形成长椭球状的 Na 原子 BEc. 用聚焦在平面的激光束将凝聚体一分为二(图 10.5), 然后去掉磁-光阱, 两团凝聚体自由下落并膨胀, 它们重叠后会发生干涉. 用光照明以探测一个"切片"内的原子密度, 结果发现干涉条纹(图 10.6). 原始距离较小的两团干涉条纹间的距离较大, 这说明凝聚体在形成、分成两团、自由下落之后仍很好地保持了相位相干. 条纹间距和曲率完全可以从凝聚体原子非线性相互作用来解释[23].

用量子光学方法研究 BEC 带来有意义的结果. W. D. Philips、邓鲁和合作者[24]用光的驻波作为光栅, 凝聚体的物质波在它上面发生 Bragg 散射, 他们建立了物质波的 Mach-Zender 干涉仪[25]. 是否能够按照需要制备具有一定相位分布的凝聚体呢? Philips 研究组创造了一个"相位刻印方法". 原子在光场中的能移被称为"光移"(light shift). 原子的光移 δE 产生相移 $\delta\phi=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}t\delta E$, 此处 t 是光脉冲维持的时间. 因此可以调整光的强度分布 $I(x,y)$ 和光脉冲的时间 t 得到在 xy 平面的相位分布, 并用 Mach-Zender 干涉仪测量. 凝聚体(物质波)相位是一个确立的理论概念, 并且可以在实验上操控.

相位的物理是热烈研究和讨论的课题. 量子相位动力学问题将在 10.5.4 节中讨论. 关于两个凝聚体间的相对相位, P. W. Anderson 提出过一个问题[26]: "两团超流液氦在地球的两端制备, 并把它们带到同一个地方, 用一个 Josephson 结把它们连接起来. 会发生 Josephson 流吗?" Josephson 流和 $\sin\delta$ 成正比, δ 是两个凝聚体间的相位差. 它们在相隔很远处制备, 从来没有机会相见. 相对相位应该是多少呢? 有两个可能的答案.

答案 1: 多次测量都没有 Josephson 流.

答案 2: 一般情况下有 Josephson 流, 但相应的相对相位每次不同.

Anderson 自己喜欢第二个答案. A. Leggett 和 F. Sols[16]给出以下答案. 考虑两个包含同样原子数 $N_1=N_2=N_0/2$ 的凝聚体. 在它们放到一起时原子数会改变, 因为可能有 Josephson 隧穿发生. 令 $N_2-N_1=2N$, 此处 N 是从凝聚体 1 转移到凝聚体 2 的原子数, 相对相位是 $\varphi=\varphi_1-\varphi_2$. 从 6.2 节的讨论得知, 体系的 Hamilton 量是

$$H=\frac{1}{2}E_J(1-\cos\varphi)+\frac{1}{2}E_C N^2. \tag{10.3.12}$$

第 1 项是耦合能, 第二项是电容能. 对于大而均匀的凝聚体 E_C 很小, 因而以耦合能为主. 这意味着可以把 φ 确定得很准确, 而 N 可以不准确. 此后的发展决定于退相干过程:

(1) 对于很长的演化时间, 退相干进行完全, 因此两个凝聚体都形成确定的粒子数的态. 当 Josephson 连接建立时, Hamilton 量式(10.3.12)成立. 系统就可以弛豫到基态, $\varphi=0$, 因此没有 Josephson 流.

---

① 参阅文献[17]p. 231, 上面提到的两个方程也称 Anderson 方程.

(2) 如果退相干很轻微，两个子系统之间可以有某种电位差，根据 Josephson 关系，相位会变化. 它们会有某个相位差，即有 Josephson 流. 但每次测量这个值会不同.
Leggett 和 Sols 得出结论："在某种条件下两个凝聚体的相对相位会是有意义的，尽管它们在物理上是分开的. 但这个条件是很苛刻的."

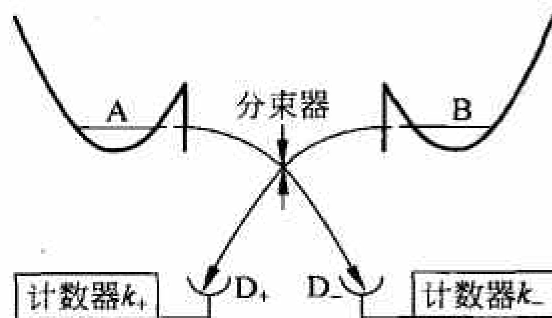


图 10.7 一个想象的实验：从两个阱中凝聚体 A 和 B 漏出的原子经分束器后被探测. 取自[27]

Y. Castin 和 J. Dalibard[27] 以及 J. Javanainen 和 S. M. Yoo[28] 进行了很有趣的研究. 下面简单介绍文献[27]的内容. 两个 Bose-Einstein 凝聚体都包含确定数量的原子. 将要证明的是：在测量它们之间干涉的实验中，它们会显得是相干的，即相位相干性是在测量过程中动力学发展起来的. 图 10.7 示出一个想象的实验. 从两个凝聚体 A 和 B 中漏出的原子在 50%-50%分束器的输出通道 D_+ 和 D_- 中被探测. 假定凝聚体有确定相位，两束分别由 $|\psi_0|e^{i\phi_a}$ 和 $|\psi_0|e^{i\phi_b}$ 描述. 分束器的两个输出强度是

$$I_+ = 2|\psi_0|^2\cos^2\phi, I_- = 2|\psi_0|^2\sin^2\phi, \tag{10.3.13}$$

此处

$$\phi = \frac{1}{2}(\phi_A - \phi_B). \tag{10.3.14}$$

在两个凝聚体间的相位差是 2ϕ 时在两个探测器中的计数分别是 k_+ 和 k_- $(k_+ + k_- = k)$ 的几率是

$$P(k_+, k_-, \phi) = \frac{k!}{k_+!k_-!}(\cos\phi)^{2k} + (\sin\phi)^{2k_-}. \tag{10.3.15}$$

假定两个凝聚体是粒子数确定的 Fock 态 $\left|\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right\rangle$（原来 Anderson 设定的条件），干涉的结果应该是怎样的呢？仿照 Leggett 和 Sols 定义相位态[16]

$$|\phi\rangle_N = \frac{1}{\sqrt{2^N N!}}(\hat{a}^\dagger e^{i\phi} + \hat{b}^\dagger e^{-i\phi})^N|0\rangle, \tag{10.3.16}$$

它描述的是确定的 $N = N_A + N_B$ 和 $\phi = \phi_A - \phi_B$ 的 EPR 态. 任何粒子数为 N 的状态 $|\psi\rangle$ 可以用相位态表示：

$$|\psi\rangle = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{d\phi}{\pi} c(\phi)|\phi\rangle_N. \tag{10.3.17}$$

Fock 态 $\left|\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right\rangle$ 可以表示为

$$\left|\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right\rangle = c_0\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{d\phi}{\pi}|\phi\rangle_N, \tag{10.3.18}$$

此处

$$c_0 = 2^{N/2}\frac{(N/2)!}{\sqrt{N!}}. \tag{10.3.19}$$

从此可见 Fock 态的相位是完全随机的. 我们来开始记录测量 Fock 态干涉的计数. 在 k 个粒子被记录后（$k_+ + k_- = k$，都是大数），Fock 态变为

$$|\Psi(k_+, k_-)\rangle \propto (\hat{a} + \hat{b})^{k_+}(\hat{a} - \hat{b})^{k_-}\left|\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right\rangle \tag{10.3.20}$$

$$= c_0\int \frac{\mathrm{d}\phi}{\pi}(\cos\phi)^{k_+}(\sin\phi)^{k_-}\mid\phi\rangle_{N-K}.$$

对于 $k_\pm \gg 1$，被积分函数可以用极大值在 ϕ_0 和 $-\phi_0$ 处的 Gauss 函数来近似，此处

$$k_+ = k\cos^2\phi_0, k_- = k\sin^2\phi_0. \tag{10.3.21}$$

算出积分，得到

$$\mid\Psi(k_+,k_-)\rangle \propto \int_{-\pi/2}^{\pi/2}\mathrm{d}\phi\left[\mathrm{e}^{-k(\phi-\phi_0)^2}+(-1)^{k_-}\mathrm{e}^{-k(\phi+\phi_0)^2}\right]\mid\phi\rangle_{N-K}. \tag{10.3.22}$$

从式(10.3.22)看出，原来的平坦分布 $c(\phi)=\text{const}$ 已经变为极大值在 $\pm\phi_0$ 的双 Gauss 函数了. 在测量的过程中动力学发展了一个相位. 当然要强调的是，对于足够大的 k, k_+, k_- 每一次测量的 ϕ_0 是随机变化的.

在 Ketterle 研究组第一次进行凝聚体间的相位差实验[22]中，一个凝聚体被激光束一分为二. 这两个凝聚体从阱中释放出来，自由膨胀并最后互相重叠. 它们间的干涉验证了相位相干. 实验之后凝聚体就弥散了. M. Saba 等[93]用 Bragg 激光束从两个凝聚体抽出小样品，并让小样品发生干涉. 这样凝聚体间的相位差就可以不断地得到监测. 这是实现原子干涉仪的第一步，它可以有很高的灵敏度和很低的噪声. 即使凝聚体处在相对相位不很确定的状态，它们也能干涉. 而一个确定的相位就在测量过程中被动力学"创造"出来，把体系的状态投影到具有确定相位的相干态上. 这是在上面的讨论所给出的结论. 他们实验的基础是光在两个相邻的 BEC 上的非弹性散射[94]. 在非弹性散射中，靶原子从光子接受动量转移 q 和能量转移 E. 非弹性散射率和结构因子 $S(q,E)$ 成正比. 测量散射原子的 q 和 E 可得出结构因子. 当光在两个具有同样粒子数和相对相位 ϕ 的凝聚体上发生非弹性散射时，结构因子是[94]

$$S(q,E) = 2\left[1+\cos\left(\frac{md}{q\hbar}\left(E-\frac{q^2}{2m}\right)+\phi\right)\right]S_0(q,E), \tag{10.3.23}$$

此处 $S_0(q,E)$ 是单个 BEC 的结构因子. 因此在 E 固定以及高动量转移情况下，结构因子，即散射光子数，对 q 显示周期为 $2h/d$ 的振荡行为. 如果将 q 固定，而相对位相随时间变化，例如由于两个凝聚体的阱深度不同因而有 $\phi=t\Delta V/h$，散射原子数也将随时间变化，变化率与相位相同. Saba 用选择原子反冲动量的非弹性散射来从两个凝聚体中得到原子波包，即从同一个相干系综中得到两个波包，影响的原子数很少. 两个波包干涉，给出强度随时间振荡的反冲原子流. 这个过程就和让两束激光发生拍音一样. 用来给与反冲原子以确定动量的实验工具就是 Bragg 散射. 两束波矢为 $\boldsymbol{k}_1$ 和 $\boldsymbol{k}_2$ 平行于两个凝聚体位移的相对传播的激光束打在原子上，吸收了光子 $\boldsymbol{k}_1$ 并在受激条件下发射光子 $\boldsymbol{k}_2$ 的原子获得了反冲动量 $\hbar(\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_2)$，只要能量转移和原子反冲能相匹配. 当从第 1 个凝聚体出来的原子到达第 2 个凝聚体时，以相同动量 q 运动的两注原子将重叠和干涉. 在实验中两个雪茄形的 Na 原子 BEC 制备在双阱的光阱中，用 Bragg 激光束照射. Bragg 散射的原子从阱中逸出，因为反冲能量要比阱的势垒高得多. 在耦合出来的原子注中吸收造影的空间调制反映了原子数的时间振荡，如图 10.8 所示.

随着每一个耦合出去的原了，有一个光子从一束激光转移到另一束. 因此在耦合出去的原子注中包含的信息也在散射光子中存在，可以用电荷耦合装置来实时监测一束光的强度获得. 结果示于图 10.9.

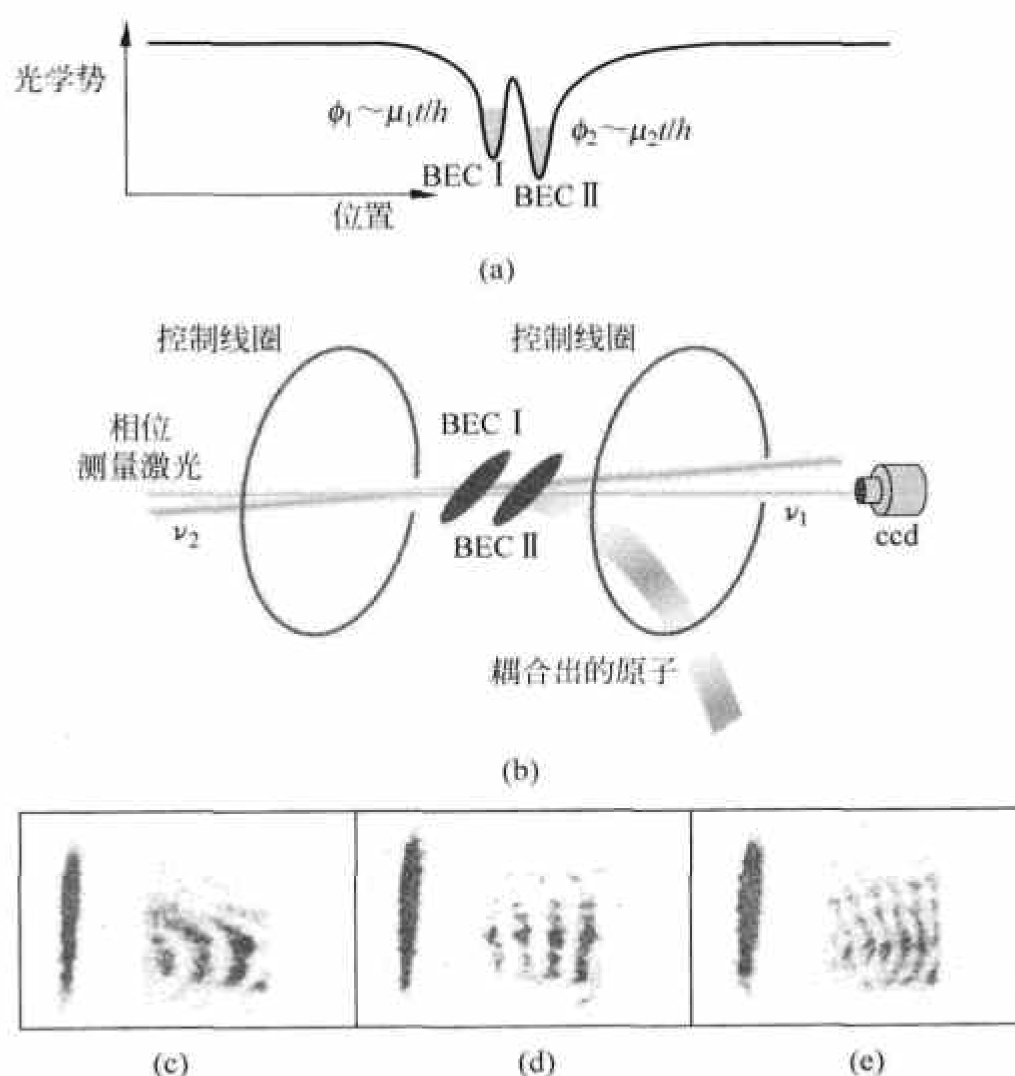


图 10.8 双阱 BEC 的干涉. 取自[93]

(a) 双阱中的 BEC; (b) 实验示意图; (c)～(e)吸收造影，显示原子云的光学密度. 所加磁场梯度是: (c) 11.5G/cm(1G=10^{-4}T), (e) −0.77G/cm. 二阱间磁场强度的不同改变了能量偏移，因此改变了拍频

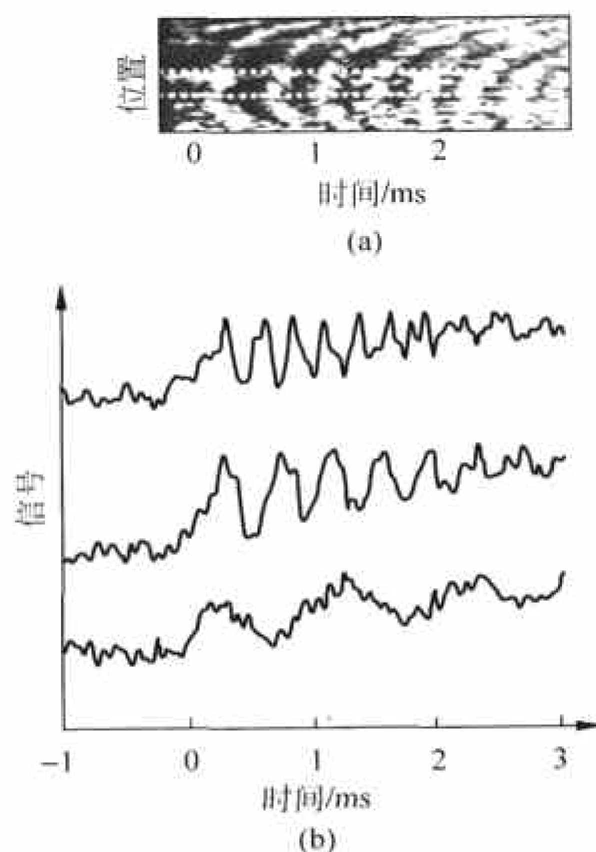


图 10.9 凝聚体相对相位的连续光学读出. 取自[93]

图(a)显示电荷耦合装置探测的光学信号造影. 不同磁场强度梯度的信号随时间的变化示于图(b). 将不同磁场强度梯度的光学造影错开是为了比较方便.

实验结果代表了走向实现原子干涉仪实际应用的真实进展. J. Javanainen[95]将此比作激光刚开始出现时的20世纪60年代,那时是有了解决方法,再寻找问题.

10.4 弱相互作用 Bose 气体:均匀凝聚体

BEC 可以在粒子间没有相互作用时发生,它是全同 Bose 子体系波函数对称性的后果. 在这个意义上可以称为"纯量子力学根源的相变". 但是它的物理却决定性地依赖于相互作用的性质. 在以上的讨论中曾提到自由 Bose 气体的 BEC 属一阶相变,而有相互作用时就不能下此结论. He Ⅱ 的超流往往和 BEC 相提并论,但实际上这两种现象还是有区别的. 在超流中有一个临界速度 v_{cr},当流体速度超过它时,在流体中能够产生导致能量转移的激发,因而产生黏滞性,即超流状态被破坏. 理想 Bose 流体的 $v_{cr}=0$. 虽然理想 Bose 流体的基态是超流体,但其稳定性会被任何运动(不论速度多小)破坏①. 气体原子 BEc 的稳定性首先取决于相互作用是排斥还是吸引,这一点将在下面讨论.

考虑不存在外场的 Bose 气体,形成凝聚体后其密度是均匀的. 先考虑 $T=0$ 的情况,这属于量子力学多体问题; 然后再讨论有限 T 情况,需要用统计力学.

10.4.1 Bogoliubov 弱相互作用 Bose 气体理论

N. N. Bogoliubov 早在1947年就提出了弱相互作用 Bose 气体理论,其中包括了引入准粒子的 Bogoliubov 变换. 它在超导和超流理论中都是很重要的. $T=0$ 时,理想 Bose 气体的基态是 $N_0=N, N_i=0(i\neq 0)$. 在有粒子相互作用时,通过二体相互作用可以有若干对粒子处于$(\boldsymbol{k}_1,-\boldsymbol{k}_1),(\boldsymbol{k}_2,-\boldsymbol{k}_2),\cdots$状态,处于$(\boldsymbol{k}_i,-\boldsymbol{k}_i)$态是二体碰撞中动量守恒的要求. 弱相互作用 Bose 气体的基态可以包含任意数量的这种对,以相干叠加的方式使能量取到最低. 相互作用能量的二次量子化形式是

$$\frac{1}{2}\int\psi^\dagger(\boldsymbol{x})\psi^\dagger(\boldsymbol{x}')V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'. \tag{10.4.1}$$

转换到动量空间,它是

$$\sum_{k,p,q}\frac{V_q}{2}a^\dagger_{p+q}a^\dagger_{k-q}a_k a_p, \tag{10.4.2}$$

式中 V_q 是 $V(\boldsymbol{x})$的相当动量传输为 $\boldsymbol{q}$ 的 Fourier 分量,$V_q=V_{-q}$. 图10.10表示相互作用所产生的跃迁. 未微扰的基态是$|\Phi_0(N)\rangle$(填空),算符 a_0 和 $a_0^\dagger$ 作用在$|\Phi_0(N)\rangle$上的结果是

$$\begin{aligned} a_0 \mid \Phi_0(N)\rangle &= \sqrt{N} \mid \Phi_0(N)\rangle, \\ a_0^\dagger \mid \Phi_0(N)\rangle &= \sqrt{N+1} \mid \Phi_0(N+1)\rangle. \end{aligned} \tag{10.4.3}$$

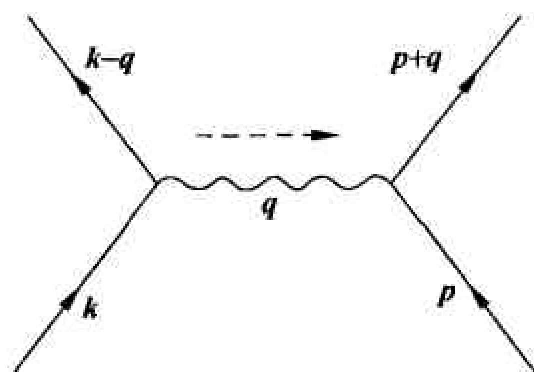


图 10.10 二粒子相互作用产生的跃迁

由于凝聚体的存在,湮灭算符 a_0 不能湮灭真空. 在量子场论中湮灭算符应该满足 $a|\mathrm{vac}\rangle=0$ 和$\langle\mathrm{vac}|a^\dagger=0$(此处$|\mathrm{vac}\rangle$代表真空态),而算符的正规乘积的真空期待值为0. 此处

① 参阅文献[29]p.75,文献[8]p.35.

式(10.4.3)可以使包含 a_0，$a_0^\dagger$ 的算符正规乘积的真空期待值不为 0，从而使建立在量子场论基础上的量子力学多体问题方法不再适用. 由于 N_0 是宏观量，N_0-1，N_0，N_0+1 没有多大区别；$|N_0-1\rangle$，$|N_0\rangle$ 与 $|N_0+1\rangle$ 也没有多大区别. 考虑 $a_0^\dagger a_0|\Phi_0(N_0)\rangle=N_0|\Phi_0(N_0)\rangle$，$a_0 a_0^\dagger|\Phi_0(N_0)\rangle=(N_0+1)|\Phi_0(N_0)\rangle\approx N_0|\Phi_0(N_0)\rangle$，因此可以作以下置换：

$$a_0 \to \sqrt{N_0}, \quad a_0^\dagger \to \sqrt{N_0}, \tag{10.4.4}$$

即将它们作 c 数看待. 其他湮灭算符 $a_k(\boldsymbol{k}\neq 0)$ 作用于真空 $|\Phi_0(N_0)\rangle\equiv|N_0,0,\cdots,0\rangle$ 时仍有

$$a_k\mid N_0,0,\cdots,0\rangle = 0, \quad \boldsymbol{k}\neq 0. \tag{10.4.5}$$

Bose 子场算符现在是

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) = \sqrt{n_0(\boldsymbol{x})} + \hat{\varphi}(\boldsymbol{x}), \tag{10.4.6}$$

$$\hat{\varphi}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}}{}' \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} a_{\boldsymbol{k}}. \tag{10.4.7}$$

此处 $n_0(\boldsymbol{x})$ 是 $\boldsymbol{k}=0$ 态上的粒子数密度，求和上的撇号“′”代表不包括 $\boldsymbol{k}=0$ 态，同时 $\hat{\varphi}$ 算符包括了所有 $\boldsymbol{k}\neq 0$ 态的湮灭算符. 这样粒子数算符

$$\hat{N}' = \sum_{\boldsymbol{p}}{}' a_{\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}} \tag{10.4.8}$$

就不再守恒，而有附加条件成立：

$$\langle \hat{N}' \rangle = N - N_0. \tag{10.4.9}$$

在写出 Hamilton 量时，式(10.4.2)中的 $\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 可以根据其中一个或两个属于 $\boldsymbol{k}=0$ 或均不属于 $\boldsymbol{k}=0$ 分为 8 项，由(a)～(h)标记：

$$\begin{aligned}\hat{H} = &\sum_{\boldsymbol{p}}{}'(\varepsilon_{\boldsymbol{p}}^0 + \underset{(\mathrm{a})}{N_0 V_0} + \underset{(\mathrm{b})}{N_0 V_{\boldsymbol{p}}}) a_{\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}} \\ &+ \sum_{\boldsymbol{p}}{}' \frac{N_0 V_{\boldsymbol{p}}}{2}(\underset{(\mathrm{c})}{a_{\boldsymbol{p}}^\dagger a_{-\boldsymbol{p}}^\dagger} + \underset{(\mathrm{d})}{a_{\boldsymbol{p}} a_{-\boldsymbol{p}}}) + \frac{1}{2}\underset{(\mathrm{e})}{N_0^2 V_0} \\ &+ \sum_{\boldsymbol{pq}}{}' \sqrt{N_0}\,\frac{V_{\boldsymbol{q}}}{2}(\underset{(\mathrm{f})}{a_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}^\dagger a_{\boldsymbol{q}} a_{\boldsymbol{p}}} + \underset{(\mathrm{g})}{a_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}^\dagger a_{-\boldsymbol{q}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}}}) \\ &+ \sum_{\boldsymbol{kpq}}{}' \frac{V_{\boldsymbol{q}}}{2}\,\underset{(\mathrm{h})}{a_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}^\dagger a_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}^\dagger a_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{p}}}.\end{aligned} \tag{10.4.10}$$

在 Hamilton 量(10.4.10)式中，所有求和都不包括 $\boldsymbol{p}=0$ 态，即零动量态不再进入，只有各 N_0 因子出现. 式中 $\varepsilon_{\boldsymbol{p}}^0$ 是未微扰的粒子能量，

$$\varepsilon_{\boldsymbol{p}}^0 = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2. \tag{10.4.11}$$

以实线代表动量不为 0 的粒子，虚线代表动量为 0 的粒子. 以上(a)～(h)各项示于图 10.11，物理意义可以直接从图上读出. 例如，(c)代表凝聚体中的两个粒子通过相互作用交换动量 $\boldsymbol{p}$ 而变成具有动量 $-\boldsymbol{p}$ 与 $\boldsymbol{p}$ 的两个粒子，属非凝聚相. 有一条虚线的图，相应的项前有一个 $\sqrt{N_0}$ 因子，这是源于一个 a_0 中 $a_0^\dagger$ 被 $\sqrt{N_0}$ 取代. 有两条虚线的图，相应的项前有 N_0. 有四条虚线的图，相应的项前有 N_0^2. 由于动量守恒，不能有由三条虚线一条实线组成的图. 从式(10.4.10)可见，$\sum_{\boldsymbol{p}}{}' a_{\boldsymbol{p}}^\dagger a_{\boldsymbol{p}}$ 与 $\hat{H}$ 并不对易. 求这个相互作用体系的能级，需要在附加条件式(10.4.9)下将 $\hat{H}$ 对角化. 用 Lagrange 不定乘子法，可以对巨正则 Hamilton 量

$$\hat{K} = \hat{H}(N_0) - \mu\hat{N}' \tag{10.4.12}$$

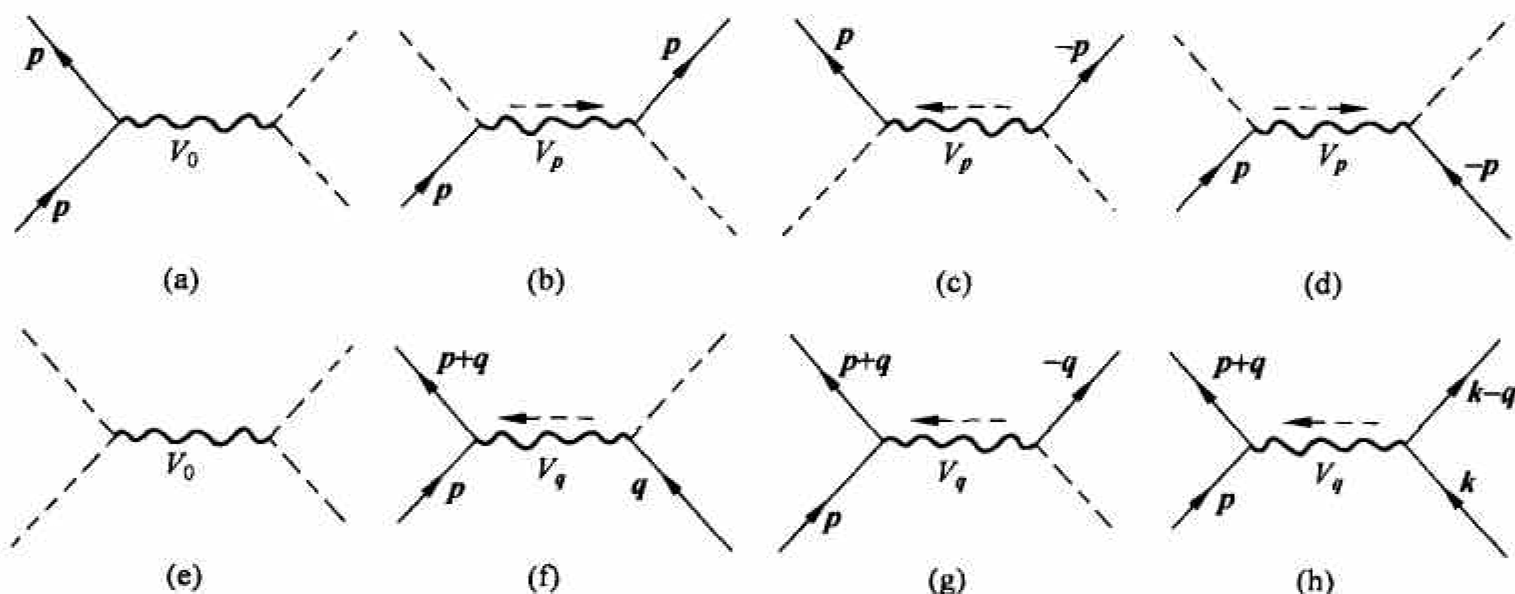


图 10.11　二体相互作用导致的各种跃迁

对角化，μ(化学势)就是不定乘子. 这个方法是 N. M. Hugenholtz 和 D. Pines 提出的[30]. 令算符$\hat{K}$，$\hat{H}(N_0)$和$\hat{N}'$的本征值分别记为$E'_0(N_0,\mu)$，$E_0(N_0,\mu)$和$N'(N_0,\mu)$，用

$$N'(N_0,\mu)+N_0=N \tag{10.4.13}$$

可以求得$\mu(N,N_0)$. 将μ代入$E_0(N_0,\mu)$，再用

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}N_0}E_0=0 \tag{10.4.14}$$

可以求得N_0. 在求解中不要求$N-N_0\ll N_0$，即对贫化较大的情况也能应用. 对$N-N_0\ll N_0$的情况，解会比较简单. 有两个关系，是在文献[30]中给出的，它们在有些情况下可以直接给出μ，不必走以上提到的正规步骤，这在下面的讨论中会有应用. 为了得到这两个关系，考虑式(10.1.19)，对量子力学基态有$S=0$，故$\mu=\dfrac{\partial E_0(V,N)}{\partial N}$. 由于$E'_0=E_0-\mu N'=E_0+\mu N_0-\mu N$，故可求出$\dfrac{\partial E'_0}{\partial N_0}=\dfrac{\partial E_0}{\partial N_0}+\mu$，而对$\hat{H}$的基态右方第一项为 0. 因此就有

$$\mu=\frac{\partial E_0}{\partial N}=\frac{\partial E'_0}{\partial N_0}. \tag{10.4.15}$$

Bogoliubov 的弱耦合近似，只取$\hat{K}$中相互作用项与N_0和N_0^2成正比的两项：

$$\hat{K}=\sum_q{}'\tilde{\varepsilon}_q a_q^\dagger a_q+\sum_q{}'N_0\frac{V_q}{2}(a_q^\dagger a_{-q}^\dagger+a_q a_{-q})+\frac{1}{2}N_0^2V_0, \tag{10.4.16}$$

其中

$$\tilde{\varepsilon}_q=\varepsilon_q^0+N_0V_0+N_0V_q-\mu. \tag{10.4.17}$$

式(10.4.16)中的第二项在n_q空间中是非对角的，需对角化. 先研究一下算符a_p的演化. 直接计算给出

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\,\hbar\frac{\mathrm{d}a_p}{\mathrm{d}t}&=[a_p,\hat{K}]\\&=\tilde{\varepsilon}_p a_p+N_0V_p a_{-p}^\dagger.\end{aligned}$$

第二个等号右方第一项是可以预期的：如果不考虑第二项，方程就是含时 Schrödinger 方程. 第二项源于相互作用，表示以a_p开始，随时间进行它会与$a_{-p}^\dagger$混合. 同样，以$a_p^\dagger$开始，随时间演化它会与a_{-p}混合. 根据这个提示，引入准粒子算符α_p，$\alpha_p^\dagger$以体现这个混合：

$$\alpha_p = u_p a_p - v_p a_{-p}^\dagger,$$
$$\alpha_p^\dagger = u_p a_p^\dagger - v_p a_{-p}, \tag{10.4.18}$$

其中 u_p 与 v_p 为 $\boldsymbol{p}$ 的实函数. 这个变换的目的是使 $\hat{K}$ 对准粒子成为对角的. 为了使算符 α_p, $\alpha_p^\dagger$ 满足对易关系

$$[\alpha_p, \alpha_q^\dagger] = \delta_{pq}, \tag{10.4.19}$$

应有

$$u_p^2 - v_p^2 = 1. \tag{10.4.20}$$

对角化要求

$$\hat{K} = \text{const} + \sum_q{}' \omega_q \alpha_q^\dagger \alpha_q$$

给出

$$[\alpha_p, \hat{K}] = \omega_p \alpha_p, \quad [\alpha_p^\dagger, \hat{K}] = -\omega_p \alpha_p^\dagger. \tag{10.4.21}$$

将式(10.4.18)代入式(10.4.16)，并用式(10.4.21)，有

$$\begin{aligned}[\alpha_p^\dagger, \hat{K}] &= -u_p(\tilde{\varepsilon}_p a_p^\dagger + N_0 V_p a_{-p}) - v_p(\tilde{\varepsilon}_p a_{-p} + N_0 V_p a_p^\dagger) \\ &= -\omega_p(u_p a_p^\dagger - v_p a_{-p}),\end{aligned}$$

因此

$$\tilde{\varepsilon}_p u_p + N_0 V_p v_p = \omega_p u_p,$$
$$N_0 V_p u_p + \tilde{\varepsilon}_p v_p = -\omega_p v_p.$$

方程组有非零解的条件给出

$$\omega_p^2 = \tilde{\varepsilon}_p^2 - N_0^2 V_p^2, \tag{10.4.22}$$

$$\left.\begin{aligned} u_p^2 &= \frac{1}{2}\left[1 + \frac{\tilde{\varepsilon}_p}{\omega_p}\right], \\ v_p^2 &= \frac{1}{2}\left[\frac{\tilde{\varepsilon}_p}{\omega_p} - 1\right]. \end{aligned}\right\} \tag{10.4.23}$$

$\hat{K}$ 对角化后变为

$$\hat{K} = \sum_q{}' \left\{\omega_q \alpha_q^\dagger \alpha_q + \frac{1}{2}(\omega_q - \tilde{\varepsilon}_q)\right\} + \frac{1}{2} N_0^2 V_0. \tag{10.4.24}$$

式(10.4.18)被称为 Bogoliubov 变换. 它的逆变换是

$$\left.\begin{aligned} a_p &= u_p \alpha_p - v_p \alpha_{-p}^\dagger, \\ a_p^\dagger &= u_p \alpha_p^\dagger - v_p \alpha_{-p}. \end{aligned}\right\} \tag{10.4.25}$$

Bogoliubov 变换导致以算符 α_p, $\alpha_p^\dagger$ 表征的准粒子. 基态称为准粒子真空，记为 $|0\rangle$，它满足条件

$$\alpha_p |0\rangle = 0. \tag{10.4.26}$$

变换的意义可以作以下的理解. 由于相互作用，体系在 $T=0$ 时的基态除有宏观量粒子布居于未微扰的 $\boldsymbol{p}=0$ 态外，还有不确定数量的对 $(\boldsymbol{q}, -\boldsymbol{q})$ 位于 $\boldsymbol{q}\neq 0$ 的态上. 就一个确定的 $\boldsymbol{q}$ 态而言，它上面可能有对，也可能没有. 因此要想产生一个准粒子 $\boldsymbol{q}$，可以用 $a_q^\dagger$（如果那里没有粒子），也可以用 a_{-q}（如果那里有一对粒子，消灭了 $-\boldsymbol{q}$ 粒子，余下一个单个的 $\boldsymbol{q}$ 粒子）. 为了确定 ω_p 还须求出化学势 μ. 这里正好用得上式(10.4.15)：基态的 $\hat{K}$ 期望值 E'_0 的带头项是

$\frac{1}{2}N_0^2V_0$，因此

$$\mu = \frac{\partial E'_0}{\partial N_0} = N_0V_0. \tag{10.4.27}$$

再用式(10.4.17)和式(10.4.22)得

$$\tilde{\varepsilon}_q = \frac{1}{2m}\boldsymbol{q}^2 + N_0V_q, \tag{10.4.28}$$

$$\omega_q = \left(\frac{q^2N_0V_q}{m} + \frac{q^4}{4m^2}\right)^{1/2}. \tag{10.4.29}$$

从式(10.4.22)看，$\omega_p < \tilde{\varepsilon}_p$，因此真空态能量中$\frac{1}{2}(\omega_q - \tilde{\varepsilon}_q)$一项是负的. 在 10.2 节讨论过粒子数锁定态与相位锁定态. 它们彼此是 Fourier 变换关系，因此具有相同能量. 但通过 Bogoliubov 变换，将不同数量、不同动量的$(\boldsymbol{p}, -\boldsymbol{p})$对相干叠加(因此凝聚体粒子数量也相应涨落)，这样使体系的能量进一步降低. 相互作用在 BEc 中选定了粒子数在 N_0 附近相干涨落的态作为基态.

从式(10.4.29)取低动量极限，得色散关系

$$\omega_q = q\sqrt{\frac{N_0V_0}{m}}, \tag{10.4.30}$$

这是集体声子态，声速是

$$s_B = \left(\frac{N_0V_0}{m}\right)^{1/2}.$$

高动量极限给出

$$\omega_q = \tilde{\varepsilon}_q = \frac{q^2}{2m} + N_0V_q. \tag{10.4.31}$$

第一项是粒子动能，第二项是非凝聚体粒子所感受的平均势能. 因此 $\tilde{\varepsilon}_q$ 就是 Hartree-Fock 单粒子能量. 此外，Bogoliubov 理论还可以用来讨论对外加扰动的响应，超流体运动等问题[29].

10.4.2 非理想 Bose 气体

对 $T\neq 0$ 的非理想 Bose 气体，必须从计算配分函数开始. 计算的方法之一是统计力学中的集团积分[6]. 另外也可以计算体系的能级，然后用 $Q_N(V,T) = \sum_n e^{-\beta E_n}$ 得出配分函数. 在相互作用势比较简单，能用微扰论解出能级的情况下，这种方法就是可行的. 实际上原子间的相互作用势甚为复杂. 它有一个很强的排斥芯(称为硬球势)，但由于硬球芯很小，就有可能采用一种近似法，称为赝势法. 它将相互作用势转变成有效作用势，只通过低能相移参数表示，这就使微扰计算得到简化. 硬球 Bose 气体理论是由杨振宁、李政道、黄克孙在 20 世纪 50 年代后期发展的[31,32]①. 在量子力学中，低能散射的散射相移与势的形状无关，而只依赖于一个参数 a，称为散射长度. 在 $r\to\infty$ 时散射波函数 ψ_∞ 是

$$r\psi_\infty = \text{const}(\sin kr + \tan\eta_0 \cos kr),$$

① 请参阅文献[6]第 10 章、第 13 章.

此处 k 是波矢大小，η_0 是相移. 在低能情况下 $k\to0$，就有

$$\psi_\infty \xrightarrow{k\to0} \mathrm{const}\left(1+\frac{\tan\eta_0}{kr}\right),$$

其中

$$\tan\eta_0=-ka.$$

对排斥势，$a>0$；对吸引势，$a<0$. 硬球势（硬球芯半径为 a）在低能散射情况下的散射长度正好等于球芯半径. 在低温下的非理想气体有三个参数，即 de Broglie 热波长 λ、粒子间平均距离 $v^{1/3}$ 以及散射长度 a. 在赝势法中 a/λ 和 $a/v^{1/3}$ 都是小参数. 前者是低温的条件，后者是稀薄的条件. 硬球势散射方程及边界条件是

$$\left.\begin{aligned}(\nabla^2+k^2)\psi=0,\quad & r>a\\ \psi(r)=0,\quad & r<a\end{aligned}\right\} \tag{10.4.32}$$

E. Fermi 在 1936 年证明，对 $r>a$ 的波函数，这种散射就相当于一个有效相互作用

$$V=\frac{4\pi a\,\hbar^2}{m}\sum_{i<j}\delta^3(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\frac{\partial}{\partial r_{ij}}r_{ij}. \tag{10.4.33}$$

这样就完成了以下过程：将物理上的粒子间作用势在低能散射下归结为硬球，然后用 Fermi 的方法，把式(10.4.32)中的边界条件纳入了有效相互作用(式(10.4.33)). 所以称为赝势，是因为它除依赖距离 r_{ij} 以外还包含一个球导数的算符. 算符 $\frac{\partial}{\partial r}r$ 作用于一个波函数 $\psi(r)$，结果是 $\frac{\partial}{\partial r}r\psi=\psi+r\frac{\partial\psi}{\partial r}$. 在前面的 $\delta(r)$ 作用下，如果 ψ 在 $r\to0$ 时是正规的，则有 $\frac{\partial}{\partial r}r\psi\to\psi$，$\frac{\partial}{\partial r_{ij}}r_{ij}$ 就可以被 1 替代. 在一阶微扰论计算中，赝势只作用于非微扰波函数，因此可将 $\frac{\partial}{\partial r_{ij}}r_{ij}$ 换成 1. 在高阶微扰中它就发挥重要作用，从而得出重要的物理结果[31,32]. 限于一阶微扰，H 是

$$H=\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2+\cdots+\nabla_n^2)+\frac{4\pi a\,\hbar^2}{m}\sum_{i<j}\delta^3(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j), \tag{10.4.34}$$

未微扰状态用 $\{n_p\}$ 表征，n_p 为单粒子态 $\boldsymbol{p}$ 上的粒子数：

$$\Phi_n=\{\cdots n_p\cdots\}. \tag{10.4.35}$$

在 Φ_n 态中能量平均值是①

$$E_n=(\Phi_n,H\Phi_n)=\sum_{p}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}n_p+\frac{4\pi a\,\hbar^2}{mV}\left(N^2-\frac{1}{2}\sum_{p}n_p^2\right). \tag{10.4.36}$$

在低温时，$\boldsymbol{p}\neq0$ 态上的布局数很低，上式第二项括弧中 $n_p(\boldsymbol{p}\neq0)$ 可以略去，因此

$$E_n=\sum_{p}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}n_p+\frac{4\pi a\,\hbar^2}{mV}\left(N^2-\frac{1}{2}n_0^2\right). \tag{10.4.37}$$

配分函数是

$$Q_n=\sum_{\{n_p\}}\exp\left\{-\beta\left[\sum_{p}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}n_p+\frac{4\pi a\,\hbar^2}{mV}\left(N^2-\frac{1}{2}n_0^2\right)\right]\right\}. \tag{10.4.38}$$

① 参阅文献[6]附录 A.

进一步计算给出①

$$\frac{1}{N}\ln Q_N = \begin{cases} \dfrac{v}{\lambda^3}g_{5/2}(z) - \ln z - \dfrac{2a\lambda^2}{v}, & v > v_c, T > T_E; \\ \dfrac{v}{\lambda^3}g_{5/2}(1) - 2\dfrac{a\lambda^2}{v}\left[1 - \dfrac{1}{2}\left(1 - \dfrac{v}{v_c}\right)^2\right], & v < v_c, T < T_E. \end{cases} \tag{10.4.39}$$

从此可得出系统的宏观性质，例如对 $T>T_E$，有

$$\lambda^3 \frac{P}{kT} = g_{5/2}(z) - \frac{2a}{\lambda}(g_{3/2}(z))^2 + \cdots$$

$$\rho = z\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{P}{kT}\right) = \lambda^{-3}\left(g_{3/2}(z) - \frac{4a}{\lambda}g_{3/2}(z)g_{1/2}(z) + \cdots\right).$$

10.5　弱相互作用 Bose 气体：非均匀凝聚体

10.5.1　凝聚性质与外场的关系

在研究原子气体 BEC 的装置中会用磁场和磁-光阱或激光阱. 有外场存在时，凝聚体的密度是位置坐标的函数. 在外场中，凝聚体的性质，例如临界温度、凝聚粒子数比率以及 Bose 气体热容量等，都依赖于势的形式[33]. 先考虑在外场 $U(\boldsymbol{r})$ 中的 N 个理想 Bose 气体粒子，它们在温度 T 下依各量子能级 ε 分布

$$n_\varepsilon = \frac{g_\varepsilon}{e^{(\varepsilon-\mu)/kT} - 1}, \tag{10.5.1}$$

此处 g_ε 是能级简并度，μ 是化学势. 基态能量取为 0. 设能级间距远较 kT 为小，即：$kT \gg \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i$. 能级密度取决于外场的势 $V(\boldsymbol{r})$，可以用半径典近似估计. 在相空间中每 h^3 体积中有一个能级. 能量为 ε 的粒子被势局限在体积 $\mathcal{V}(\varepsilon)$ 内，动量空间体积元为 $4\pi p^2 dp = 4\pi mp d\varepsilon = 4\pi m(2m)^{\frac{1}{2}}\sqrt{\varepsilon - V(\boldsymbol{r})}\, d\varepsilon$. 因此态密度是

$$\rho(\varepsilon) = \frac{(2\pi)(2m)^{3/2}}{h^3}\int_{\mathcal{V}(\varepsilon)} \sqrt{\varepsilon - V(\boldsymbol{r})}\, d^3 r. \tag{10.5.2}$$

化学势与总粒子数 N 的关系由下式决定：

$$N = N_0 + \int_0^\infty n_\varepsilon \rho(\varepsilon) d\varepsilon. \tag{10.5.3}$$

和自由粒子情况类似，由于 $\rho(0) = 0$，基态上粒子的贡献需单独写出. 设 $g_\varepsilon = 1$，将上式展开，得

$$N = N_0 + \sum_{j=1}^\infty \exp\left(\frac{j\mu}{kT}\right)\int_0^\infty \rho(\varepsilon)\exp\left(\frac{-j\varepsilon}{kT}\right)d\varepsilon, \tag{10.5.4}$$

取带头项作出积分，可得 $\mu(T)$.

临界温度 T_c 的决定与自由粒子的 T_E 类似，即在式(10.5.3)中设 $N_0 = 0$，$\mu = 0$，解出的 T 就是. 体系总能量是

$$E(T) = \int_0^\infty \varepsilon n_\varepsilon \rho(\varepsilon) d\varepsilon. \tag{10.5.5}$$

---

① 参阅文献[6]第 12 章.

热容量即可求出：

$$C(T)=\frac{\partial E(T)}{\partial T}=\frac{1}{kT}\int_0^{\infty}\frac{\varepsilon\rho(\varepsilon)}{g_\varepsilon}(n_\varepsilon)^2\left[\frac{\partial\mu}{\partial T}+\frac{\varepsilon-\mu}{T}\right]\exp\left(\frac{\varepsilon-\mu}{kT}\right)\mathrm{d}\varepsilon. \tag{10.5.6}$$

文献[20]研究了各向异性幂次势. 下面仅举一例说明势对各种参数的影响，列于表 10.1.

表 10.1　势对 BEc 参数的影响

势	T_c	$\frac{N_0}{N}(T<T_c)$	$C(T_{c-})/Nk$
三维方盒	$\frac{2\pi\hbar^2}{km}\left(\frac{N}{2.612V}\right)^{2/3}\equiv T_E$	$1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$	1 92
$V(r)=\varepsilon_1\left(\frac{r}{a}\right)^2$ (各向同性谐振子)	$\sqrt{\frac{2}{m}}\frac{\hbar}{k}\left(\frac{N}{1.202}\right)^{1/3}\left(\frac{\varepsilon_1}{a^2}\right)^{1/2}$	$1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^3$	10.82

下面推广到弱相互作用 Bose 气体. 从二体作用势式(10.4.34)得到平均每个粒子相互作用能 $E_{\mathrm{int}}=\frac{2\pi a\hbar^2}{m}\left(\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\mathcal{V}}\right)$①，此处$\frac{\partial N}{\partial\mathcal{V}}$是粒子数密度. 因此，半经典近似的 Hamılton 量可以写为

$$H(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r})=\frac{p^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})+\frac{2\pi a\hbar^2}{m}n(\boldsymbol{r}). \tag{10.5.7}$$

阱中粒子密度 $n(\boldsymbol{r})$应为

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\mathcal{V}}=\sum_\varepsilon n_\varepsilon\mid\psi_\varepsilon\mid^2,$$

这很难精确计算. 但用半经典近似，有

$$\mathrm{d}N=\frac{1}{h^3}n(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3p\mathrm{d}^3r, \tag{10.5.8}$$

此处

$$n(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r})=\frac{1}{\mathrm{e}^{[(p^2/2m)+V(r)-\mu]/kT}-1}. \tag{10.5.9}$$

粒子数密度是

$$\left(\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\mathcal{V}}\right)_{p,r}=\frac{1}{h^3}n(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3p.$$

对动量积分，有

$$\left(\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\mathcal{V}}\right)_r=\frac{4\pi}{h^3}\int p^2n(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r})\mathrm{d}p. \tag{10.5.10}$$

令 $x=\frac{p^2}{2mkT}$，上式变为

$$\begin{aligned}\left(\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\mathcal{V}}\right)_r&=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{\lambda^3}\int_0^{\infty}x^{1/2}\frac{1}{\mathrm{e}^{x+(V(r)/kT)-(\mu/kT)}-1}\\&=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{\lambda^3}\sum_{t=0}^{\infty}\exp\left[-t\left(\frac{V}{kT}-\frac{\mu}{kT}\right)\right]\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-tx}x^{1/2}\mathrm{d}x.\end{aligned} \tag{10.5.11}$$

---

① 由式(10 4.38)读出总相互作用能($n_0=N$ 情况)为$\frac{2\pi a\hbar^2}{m\mathcal{V}}N^2$，平均每个粒子能量为$\frac{2\pi a\hbar^2}{m}\left(\frac{N}{\mathcal{V}}\right)$.

此处 λ 是 de Broglie 热波长，以上用了 $\frac{1}{1-y}=\sum_{t=0}^{\infty}y^t$. 积分后得

$$\left(\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\mathcal{V}}\right)_r=\frac{1}{\lambda^3}\sum_{t=1}^{\infty}\mathrm{e}^{t[\mu-V(r)]/kT}\frac{1}{t^{3/2}}. \tag{10.5.12}$$

在 $\mu\lesssim 0$ 时，求和可以只取带头的第一项，即取 $t=1$，式(10.5.7)变为

$$H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})=\frac{p^2}{2m}+V_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{r}),$$

此处

$$V_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{r})=V(\boldsymbol{r})+\frac{2\pi\hbar^2a}{m\lambda^3}\mathrm{e}^{-V(r)/kT}. \tag{10.5.13}$$

文献[33]考虑了圆柱势的情况，给出了有关参数的结果.

低空间维中的 BEC 是个有趣的课题. 从式(10.5.4)开始. 右方的第二项给出在各激发态上的粒子数 N_{ex}. 它决定性地依赖于态密度 $\rho(\varepsilon)$. 三维空间中的自由粒子态密度为 $\rho(\varepsilon)\propto\sqrt{\varepsilon}$. 积分给出 $N_{\mathrm{ex}}\propto(kT)^{3/2}g_{3/2}(z)$. 这是式(10.1.34)的第一项. 对二维 Bose 气体，动量空间的体积元是 $2\pi p\mathrm{d}p\propto\mathrm{d}\varepsilon$，能级密度 $\rho(\varepsilon)$ 与 ε 无关，因此

$$N_{\mathrm{ex}}\propto kTg_1(z).$$

Bose 函数的定义是 $g_p(z)=\sum_{l=1}^{\infty}\frac{z^l}{p^l}$，从定义知道 $g_1(1)$ 是发散的. 这意思是，在有限温度位于各激发态上的粒子数是不受限制的，即二维理想 Bose 气体在有限温度不能发生 Bose-Einstein 凝聚. 态密度起着关键的作用. 在有外场存在时，具有一定能量的粒子被局限于相应的体积中，这使 T_{C} 成为有限[34]. 具体地说，对三维各向同性谐振子势(频率为 ω)，包含粒子的体积 $v(\varepsilon)$ 与粒子能量 ε 有关. 半经典计算给出 $v(\varepsilon)\propto\varepsilon^{3/2}$，动量空间体积元 $\propto\varepsilon^{1/2}$，二者一并给出相空间体积 $\propto\varepsilon^2$，因此 $N_{\mathrm{ex}}\propto(kT)^3g_3(z\mathrm{e}^{-\hbar\omega/kT})$，而 N_{ex} 在有限温度仍为有限值，故在二维空间势阱中 BEC 可能发生.

10.5.2 阱中弱相互作用 Bose 气体的 Bose-Einstein 凝聚

在有外场时，10.4 节讨论的弱相互作用 Bose 气体的统计力学就需要将外场的影响包容进来. 早期原子物理中的 Thomas-Fermi 模型[35]便是用“局域密度近似”来处理这类问题的例子，它被称为“原子的统计理论”. J. Oliva[36]将这个办法移植到 Bose-Einstein 凝聚. 在 Thomas-Fermi 模型中，令原子中平衡电子分布与核的 Coulomb 势在原子中共同产生的势为 $V(r)$，则有

$$\frac{1}{2m}p_{\mathrm{F}}^2(r)+V(r)=\mathrm{const}, \tag{10.5.14}$$

此处 $p_{\mathrm{F}}(r)$ 为在 r 处的 Fermi 动量，它的值因在不同 r 处的电子密度不同而异. Oliva 提出，在阱中非均匀体系处于扩散平衡时，总的化学势应该为常数，即有

$$\bar{\mu}[\rho(\boldsymbol{r})]+V(\boldsymbol{r})=\mu, \tag{10.5.15}$$

此处 μ 为总化学势(常数)，$\bar{\mu}$ 为内部化学势，在一般情况下它应是密度分布函数 $\rho(\boldsymbol{r})$ 的泛函. 如果 $\rho(\boldsymbol{r})$ 的变化足够平缓，就可以采用“局域密度近似”，将非定域的泛函 $\bar{\mu}[\rho(\boldsymbol{r})]$ 用局域的坐标函数 $\bar{\mu}(\boldsymbol{r})$ 代替. 这时就有

$$\bar{\mu}(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r})=\mu. \tag{10.5.16}$$

Oliva 用从式(10.4.39)导出的自由能计算在阱中自旋确定取向的氢原子的密度分布.

邹祖德、杨振宁、余立华[37,38]严格论证了局域密度近似的成立条件，并对原子散射长度 $a>0$(排斥相互作用)情况给出一个易于用实验验证的关系，还给出了阱中 Bose 子的动量分布. 考虑谐振子阱 $V=\frac{1}{2}m\omega^2 r^2$，其中的 Bose 气体有 4 个量纲为长度的参数. 除散射长度 a 和热 de Broglie 波长 λ 以外，还有阱中谐振子基态的大小 L_2 以及能量为 kT 的经典谐振子振幅 L_1：

$$\left.\begin{aligned} L_1 &= (2\pi m\omega^2\beta)^{-1/2}, \\ L_2 &= (\hbar/m\omega)^{1/2}, \end{aligned}\right\} \tag{10.5.17}$$

此处 $\beta=1/kT$. 在局域密度近似中，空间被分成元胞，其体积介于 L_1^3 和 L_2^3 之间：

$$L_1^3 \gg \text{元胞体积} \gg L_2^3.$$

在一个元胞中势能 $V(\boldsymbol{r})$ 被当做常数. 在相互作用 Bose 体系的统计力学中的逸性 $z=\mathrm{e}^{\beta\mu}$，现在被 ζ 所取代：

$$\zeta(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\beta\bar{\mu}(r)} = \mathrm{e}^{\beta\mu}\mathrm{e}^{-\beta V(r)} = z\mathrm{e}^{-\beta V(r)}, \tag{10.5.18}$$

z 在整个体系中为常数. 巨配分函数是

$$\mathscr{D} = \prod_p \frac{1}{1-\zeta\mathrm{e}^{-\beta\epsilon_p}}. \tag{10.5.19}$$

式(10.4.39)导致的 Bose 气体(不计 BEc)密度分布函数

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \lambda^{-3}g_{3/2}(z)\left(1-\frac{4a}{\lambda}g_{1/2}(z)\right)$$

现在被 $z\to\zeta$ 置换所得的表达式取代：

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \lambda^{-3}g_{3/2}(\zeta)\left(1-\frac{4a}{\lambda}g_{1/2}(\zeta)\right), \tag{10.5.20}$$

ρ 通过 $\zeta(\boldsymbol{r})$ 依赖于位置坐标 $\boldsymbol{r}$.

对 $a=0$ 情况 $\rho(\boldsymbol{r})$ 可以严格解出，从而可以对局域密度近似作出估计. 原子体系球对称的总密度分布函数 $\rho_t(r)$ 是

$$\rho_t(r) = \langle r \mid D \mid r\rangle, \tag{10.5.21}$$

此处

$$D = \frac{z\mathrm{e}^{-\beta H}}{1-z\mathrm{e}^{-\beta H}} = \sum_{l=1}^{\infty} z^l \mathrm{e}^{-\beta H l}. \tag{10.5.22}$$

是密度算符. $\mathrm{e}^{-\beta H l}$ 的矩阵元是已知的①，代入式(10.5.22)后给出

$$\rho_t(r) = \varepsilon^{3/2}\lambda^{-3}\sum_{l=1}^{\infty}(\sinh l\varepsilon)^{-3/2}z^l\mathrm{e}^{-\sigma^2\tanh l\varepsilon/2}, \tag{10.5.23}$$

此处

$$\varepsilon = \frac{\hbar\omega}{kT}, \quad \sigma = \frac{r}{L_2}. \tag{10.5.24}$$

式(10.5.23)中的级数记为 $\sum_l a_l$，它的收敛条件由下式决定(对大的 l 值)：

---

① 见 Feynman R P. Statistical Mechanics. Reading: W. A. Benjamin Inc., 1972, p. 49.

$$\left(\frac{a_{l+1}}{a_l}\right)=z\left(\frac{\mathrm{e}^{(l+1)\varepsilon}}{\mathrm{e}^{l\varepsilon}}\right)^{-\frac{3}{2}}=z\mathrm{e}^{-(3/2)\varepsilon}\equiv z_1<1. \tag{10.5.25}$$

对 $z_1=1$，级数对任何 r 值都发散. 与均匀 Bose 气体情况相比，可知若将发散部分分出，它就相当于 BEc，而余下的部分则属于"热气体". 取式(10.5.23)中级数的一般项 a_l 的对数，

$$\begin{aligned}\ln a_l &= l(\ln z)-\frac{3}{2}\ln\sinh l\varepsilon-\sigma^2\tanh\frac{l\varepsilon}{2}\\ &= l\left(\ln z-\frac{3}{2}\varepsilon\right)+\left(\frac{3}{2}\ln 2-\sigma^2\right)+c_l,\end{aligned}$$

此处 $c_l\to 0$，当 $l\to\infty$. 即在 l 足够大时

$$a_l\to 2^{3/2}\mathrm{e}^{-\sigma^2}z_1^l\mathrm{e}^{c_l}.$$

将 a_l 改写：

$$a_l=2^{3/2}\mathrm{e}^{-\sigma^2}z_1^l+2^{3/2}\mathrm{e}^{-\sigma^2}z_1^l(\mathrm{e}^{c_l}-1),$$

$$\sum_l a_l=2^{3/2}\mathrm{e}^{-\sigma^2}\frac{z_1}{1-z_1}+2^{3/2}\mathrm{e}^{-\sigma^2}\sum_l z_1^l(\mathrm{e}^{c_l}-1).$$

代回式(10.5.23)有

$$\rho_t(r)=\frac{z_1}{1-z_1}\mid\psi_0(r)\mid^2+\rho(r), \tag{10.5.26}$$

右方第一项是在 $z_1=1$ 时的发散项，即凝聚体的密度分布，而

$$\psi_0(r)=2^{3/4}\mathrm{e}^{-r^2/2L_2^2} \tag{10.5.27}$$

正是谐振子基态波函数. 第二项

$$\rho(r)=\lambda^{-3}(2\varepsilon)^{3/2}\sum_{l=1}^{\infty}z_1^l\left\{\frac{1}{(1-\mathrm{e}^{-2l\varepsilon})^{3/2}}\mathrm{e}^{-\sigma^2\tanh\frac{\varepsilon l}{2}}-\mathrm{e}^{-\sigma^2}\right\} \tag{10.5.28}$$

是正常气体部分. 这证明了在势 $V(r)$ 场中凝聚体正是按基态波函数分布. 式(10.5.28)的求和在 $z_1=1$ 时仍是收敛的. 式(10.5.26)～(10.5.28)是精确的，可用以判断局域密度近似的精确程度. 考虑 $\varepsilon\ll 1$ 情况. 式(10.5.28)的求和中，$\varepsilon l>1$ 的各项因花括弧中二项抵消贡献可略去. 对 $\varepsilon l<1$ 的各项，可用以下置换：$1-\mathrm{e}^{-2l\varepsilon}\to 2l\varepsilon$，$\tanh\frac{\varepsilon l}{2}\to\frac{\varepsilon l}{2}$，而 $\mathrm{e}^{-\sigma^2}$ 项可略去. 求和项变为

$$\sum_1^{\infty}\frac{\left[z_1\exp\left(-\frac{1}{2}\beta m\omega^2r^2\right)\right]^l}{l^{3/2}}=g_{3/2}\left[z_1\exp\left(-\frac{1}{2}\beta m\omega^2r^2\right)\right]$$

因而有

$$\rho_t(r)\approx\frac{z_1}{1-z_1}\mid\psi_0(r)\mid^2+\lambda^{-3}g_{3/2}\left[z_1\exp\left(-\frac{1}{2}\beta m\omega^2r^2\right)\right]. \tag{10.5.29}$$

式(10.5.20)在 $a=0$ 情况下给出的正是上式第二项，仅将 z 换成 z_1. 对 $\varepsilon\ll 1$，这个置换带来的误差可不计. 在气体相，$1-z_1=O(1)$，式(10.5.29)第二项为主，因此局域密度近似很好. 在凝聚相，$1-z_1\approx O(N^{-1})$，因此在第二项中可置 $z_1=1$，这使它与近似表达式完全相同. 对凝聚相本身还须进一步讨论. 式(10.5.28)在 $a=0$ 时是 $\rho(r)=\lambda^{-3}g_{3/2}(z\mathrm{e}^{-\beta\frac{1}{2}m\omega^2r^2})$. 对体系增加粒子使 z 值增大，但 $g_{3/2}$ 的宗量的最大可能值为 1. 因此，首先是在 $r=0$ 处宗量值先达到 1. 如果再增加粒子，便要在 $r=0$ 处产生凝聚. 在局域密度近似中，BEc 的密度分布是 δ 函数型的，精确结果的密度分布是 $|\psi_0(r)|^2$. 这个区别正好说明近似的性质. 在将空间分成元

胞时，元胞的尺度甚大于 L_2，因此 $\psi_0(r)$ 的尺度 L_2 对元胞而言就缩成了一点.

对 $a=0$ 情况，体系 Hamilton 量为

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$

具有 x,p 的置换对称：

$$p \leftrightarrow x, \quad \frac{1}{m} \leftrightarrow m\omega^2.$$

配分函数 $Q_N(V,T) = \mathrm{tr}\ e^{-\beta H}$ 对这个置换不变. 因此 BEc 的动量分布一定是 $|\psi_0(p)|^2$. 对 $a \neq 0$ 的情况，阱中 Bose 气体的动量分布在文献[24]中有详细讨论.

对 $a>0$ 情况，式(10.5.28)在准到 a/λ 一阶时可以写作

$$\rho(r) = \lambda^{-3} g_{3/2}(z e^{-\beta V(r) - 4a\lambda^2 \rho(r)}), \tag{10.5.30}$$

在体系粒子数增加时，仍在 $r=0$ 处开始凝聚. 在均匀体系中 $\mu = kT\ln z$，在阱中局域密度近似给出

$$\bar{\mu}(r) = kT\ln(z e^{-\beta V}) = kT\ln z - V(r). \tag{10.5.31}$$

式(10.5.30)给出饱和气体密度 $\rho_0 = \lambda^{-3} g_{3/2}(1)$，因此凝聚体密度为 $\rho_c = \rho_t - \rho_0$. 式(10.4.39)给出体系的 Helmholtz 自由能 $A = -\frac{1}{\beta}\ln Q_N$，则有

$$\frac{A}{V} = -kT\lambda^{-3} g_{5/2}(1) + 2a\lambda^2 kT\rho_t^2 - a\lambda^2 kT\rho_c^2, \tag{10.5.32}$$

从此可以得到化学势 $\bar{\mu} = \frac{\partial}{\partial \rho_t}\left(\frac{A}{V}\right)\bigg|_{V,T}$：

$$\begin{aligned}\bar{\mu} &= [4a\lambda^2 \rho_t - 2a\lambda^2(\rho_t - \rho_0)]kT \\ &= \frac{a4\pi\hbar^2}{m}(\rho_t + \rho_0).\end{aligned}$$

上式与式(10.5.31)相等，得

$$kT\ln z - V(r) = 4\pi a(\rho_t + \rho_0)\hbar^2/m.$$

在凝聚体边界，$r = r_0$，$\rho_c = 0$，$\rho_t = \rho_0$，因此有

$$V(r) + 4\pi a \rho_t(r)\hbar^2/m = V(r_0) + 4\pi a \rho_0 \hbar^2/m. \tag{10.5.33}$$

这个关系对任何阱势 $V(r)$ 成立，在实验上是可以检验的.

10.5.3 Gross-Pitaevskii 方程

在有外场时，与式(10.4.6)相对应的场算符关系是

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) = \Psi(\boldsymbol{x}) + \hat{\varphi}(\boldsymbol{x}), \tag{10.5.34}$$

此处

$$\Psi(\boldsymbol{x}) = \langle \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \rangle, \tag{10.5.35}$$

是凝聚体波函数，而 $\hat{\varphi}(\boldsymbol{x})$ 是非凝聚体各态的场算符，满足

$$\langle \hat{\varphi}(\boldsymbol{x}) \rangle = 0. \tag{10.5.36}$$

下面从 $\hat{\psi}$ 的运动方程出发，在平均场近似下导出 Ψ 及 $\hat{\varphi}$ 所满足的演化方程及本征方程. 二次量子化的 Hamilton 量是

$$\hat{H}=\int \mathrm{d}^3 x \hat{\psi}^{\dagger}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\hat{\psi}+\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^3 x \mathrm{d}^3 x' U(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'),\tag{10.5.37}$$

此处在弱相互作用 Bose 气体近似下，有

$$U(\boldsymbol{r})=\frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\delta^3(\boldsymbol{r}).\tag{10.5.38}$$

用式(10.5.38)，$\hat{H}$的第二项变为$\int \mathrm{d}^3 x \frac{2\pi\hbar^2 a}{m}\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$. $\hat{\psi}$ 满足的运动方程是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{\psi}}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\hat{\psi}+V(\boldsymbol{x})\hat{\psi}+\frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\hat{\psi}^{\dagger}\hat{\psi}\hat{\psi}.\tag{10.5.39}$$

将式(10.5.34)代入式(10.5.39)，并取此式平均，考虑到$\langle\hat{\varphi}\rangle=\langle\hat{\varphi}^{\dagger}\rangle=0$，$\langle\hat{\varphi}^{\dagger}\hat{\varphi}\rangle=n'(\boldsymbol{r},t)$，得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+V(\boldsymbol{x})\Psi+\frac{4\pi\hbar^2 a}{m}(2n'+|\Psi|^2)\Psi.\tag{10.5.40}$$

这是凝聚体波函数满足的方程，由于$|\Psi|^2\Psi$项，它是非线性的.

求 $\hat{\varphi}$ 所满足的方程要用平均场方法. 考虑

$$\begin{aligned}\hat{\psi}^{\dagger}\hat{\psi}\hat{\psi}&=(\Psi^{\dagger}+\hat{\varphi}^{\dagger})(\Psi+\hat{\varphi})(\Psi+\hat{\varphi})\\&=|\Psi|^2\Psi+2|\Psi|^2\hat{\varphi}+\Psi\hat{\varphi}\hat{\varphi}+\Psi^2\hat{\varphi}^{\dagger}+2\Psi\hat{\varphi}^{\dagger}\hat{\varphi}+\hat{\varphi}^{\dagger}\hat{\varphi}\hat{\varphi}\end{aligned}$$

在进行线性化时，双线型 $\hat{\varphi}^{\dagger}\varphi$ 用其平均值n'代替，$\hat{\varphi}\hat{\varphi}$ 的平均值为 0. 注意到 $\hat{\varphi}^{\dagger}\hat{\varphi}\hat{\varphi}$ 约化时，$\hat{\varphi}^{\dagger}$要和两个 $\hat{\varphi}$ 因子分别组合，故有 $\hat{\varphi}^{\dagger}\hat{\varphi}\hat{\varphi}\rightarrow 2n'\hat{\varphi}$. 这种做法略去了场的涨落，对其推论应持谨慎态度. 上面的算符 $\hat{\psi}^{\dagger}\hat{\psi}\hat{\psi}$ 约化为

$$\hat{\psi}^{\dagger}\hat{\psi}\hat{\psi}\rightarrow 2n'\hat{\varphi}+2n'\Psi+\Psi^2\hat{\varphi}^{\dagger}+2|\Psi|^2\hat{\varphi}+|\Psi|^2\Psi,\tag{10.5.41}$$

即完成了 $\hat{\varphi}$ 算符的线性化. 从式(10.5.39)减去式(10.5.40)，并用式(10.5.41)，得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{\varphi}}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\hat{\varphi}+V(\boldsymbol{r})\hat{\varphi}+\frac{4\pi\hbar^2 a}{m}[2(|\Psi|^2+n')\hat{\varphi}+\Psi^2\hat{\varphi}^{\dagger}].\tag{10.5.42}$$

式(10.5.40)和式(10.5.42)是耦合方程. 通常在式(10.5.40)中略去 n'，因为在 BEc 形成后，$|\Psi|^2$ 要比 n'大得多. 这样式(10.5.40)就变为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+V(\boldsymbol{r})\Psi+\frac{4\pi\hbar^2 a}{m}|\Psi|^2\Psi.\tag{10.5.43}$$

这是 Gross-Pitaevskii 方程[39-41]（以下简称 G. P. 方程）.

从式(10.5.43)可以得到定态的 G. P. 方程. 序参量的时间依赖是

$$\Psi(\boldsymbol{x},t)=\langle\hat{\psi}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\rangle=\Psi(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu t/\hbar},$$

此处 $\mu=E(N)-E(N-1)\sim\partial E/\partial N$ 是化学势. 将上式代入式(10.5.43)就得到定态 G. P. 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+V(\boldsymbol{r})\Psi+\frac{4\pi\hbar^2 a}{m}|\Psi|^2\Psi=\mu\Psi.\tag{10.5.43a}$$

G. P. 方程的应用广泛而成功. E. H. Lieb 等[67]从严格证明的角度重新考虑了这个问题. 他们首先证明了每个原子的相互作用能量的下限是 $2\pi\hbar^2 a\rho/m\,(a>0)$；再进一步，E. H. Lieb 等[68]严格推导了 $a>0$ 情况下的 G. P. 泛函.

10.5.4 量子相位动力学

凝聚体的基态往往用具有确定相位的相干态描述. 但相干态并不是如相互作用的均匀凝聚体这样的简单 Hamilton 量的本征态. 相位的扩散是不可避免的. 在 $T=0$ 的凝聚体要发生相位扩散是因为确定的相位是和确定原子数不相容的. M. Lewenstein 和尤力[42]研究了 Bose-Einstein 凝聚体的相位扩散问题. 二次量子化的 Hamilton 是

$$\mathscr{H}=\int d^3r\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2+V_t(\boldsymbol{r})-\mu\right]\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})+\frac{u_0}{2}\int d^3r\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}), \tag{10.5.44}$$

在这里 $u_0=4\pi\hbar^2a/M$, a 是散射长度. 平均粒子数守恒通过 Lagrange 不定乘子项 $\mu\hat{N}=\mu\int d^3r\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})$ 得到反映, μ 是化学势. 用 Bogolliubov 近似, 设

$$\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})=\sqrt{N}\psi_0(\boldsymbol{r})+\delta\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}), \tag{10.5.45}$$

此处 ψ_0 是凝聚体基态波函数(设为实函数), 归一化到 $\int d^3r\,|\psi_0(\boldsymbol{r})|^2=1$, $\delta\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})$ 是量子涨落. 将式(10.5.45)代入式(10.5.44), 并略去 $\delta\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})$的三次和四次项. 如果 ψ_0 是 G. P. 方程的解, 一次项就将为零：

$$[\mathscr{L}+u_0\rho(\boldsymbol{r})]\psi_0(\boldsymbol{r})=0, \tag{10.5.46}$$

此处

$$\mathscr{L}=-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2+V_t(\boldsymbol{r})-\mu, \tag{10.5.47}$$

$$\rho(\boldsymbol{r})=N\psi_0^2(\boldsymbol{r}).$$

Hamilton 量除一个常数项外就成为 $\delta\hat{\Psi}$ 和 $\delta\hat{\Psi}^\dagger$ 的二次型：

$$\mathscr{H}=\int d^3r\delta\hat{\Psi}^\dagger\mathscr{L}\delta\hat{\Psi}+\frac{u_0}{2}\int d^3r\rho(\boldsymbol{r})(\delta\hat{\Psi}^\dagger\delta\hat{\Psi}^\dagger+\delta\hat{\Psi}\delta\hat{\Psi}+4\delta\hat{\Psi}^\dagger\delta\hat{\Psi}). \tag{10.5.48}$$

引入准粒子的湮灭和产生算符

$$g_k=\int d^3r[U_k(\boldsymbol{r})\delta\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})+V_k(\boldsymbol{r})\delta\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{r})] \tag{10.5.49}$$

$$g_k^\dagger=\int d^3r[U_k^*(\boldsymbol{r})\delta\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{r})+V_k^*(\boldsymbol{r})\delta\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})].$$

U 和 V 是 $\boldsymbol{r}$ 的复函数, 相当于均匀情况下的 u_p 和 ν_p(10.4.1 节), 有时被称为阱模式. 算符 g_k 和 $g_k^\dagger$ 满足 Bose 对易关系

$$[g_k,g_{k'}^\dagger]=\delta_{kk'}\ \text{和}[g_k,g_{k'}]=0, \tag{10.5.50}$$

根据式(10.5.49), 以上关系导致双正交归一条件：

$$\int d^3r(U_k(\boldsymbol{r})U_{k'}^*(\boldsymbol{r})-V_k(\boldsymbol{r})V_{k'}^*(\boldsymbol{r}))=\delta_{kk'}. \tag{10.5.51}$$

我们期望在对角化之后能够得到

$$\mathcal{H}\sim\sum_k\hbar\omega_kg_k^\dagger g_k. \tag{10.5.52}$$

这个形式是试探性的, 将在下面的发展中精确化. 上式导致

$$[\mathcal{H},g_k]=-\hbar\omega_k,[\mathcal{H},g_k^\dagger]=\hbar\omega_k. \tag{10.5.53}$$

这正是我们预期的,因为 g_k 作用在$\mathcal{H}$的本征态上会减少它的本征值$\hbar\omega_k$. 用式(10.5.48)和式(10.5.49)计算$[\mathcal{H},g_k]$,并将结果与式(10.5.53)比较,得到

$$[\mathcal{L}+2u_0\rho(\boldsymbol{r})]U_k(\boldsymbol{r})-u_0\rho(\boldsymbol{r})V_k(\boldsymbol{r})=\hbar\omega_k U_k(\boldsymbol{r}), \tag{10.5.54}$$
$$[\mathcal{L}+2u_0\rho(\boldsymbol{r})]V_k(\boldsymbol{r})-u_0\rho(\boldsymbol{r})U_k(\boldsymbol{r})=-\hbar\omega_k V_k(\boldsymbol{r}).$$

这是准粒子波函数的 Bogoliubov-de Gennes 方程. 在时间反演下,有

$$U_k\leftrightarrow U_k^*, V_k\leftrightarrow V_k^*; \tag{10.5.55}$$
$$\delta\hat{\Psi}\leftrightarrow\delta\hat{\Psi}^\dagger, g_k\leftrightarrow g_k^\dagger.$$

因此时间反演不变性要求对应于 ω_k 的一组解(U_k,V_k),一定存在$-\omega_k$ 的一组解(V_k^*,U_k^*). 方程式(10.5.54)对于 $\omega_0=0$ 有唯一解 $U_0(\boldsymbol{r})=V_0^*(\boldsymbol{r})\propto\psi_0(\boldsymbol{r})$. 这就是源于整体 $U(1)$对称破缺的 Goldstone 模.

仿照式(10.5.49)来定义零模的湮灭算符是个诱人的尝试:

$$\hat{P}=\int d^3r\psi_0(\boldsymbol{r})[\delta\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})+\delta\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{r})]. \tag{10.5.56}$$

但这个算符是厄密的,作为厄密算符不能成为产生和湮灭算符. 由于 G. P. 方程式(10.5.46), $\hat{P}$也和 Hamilton 量算符对易:

$$[\hat{P},\mathcal{H}]=\int d^3r\{\psi_0(\mathcal{L}+u_0\rho)\delta\hat{\Psi}-\psi_0(\mathcal{L}+u_0\rho)\delta\hat{\Psi}^\dagger\}=0 \tag{10.5.57}$$

因为双正交归一条件式(10.5.51),它也和 g_k 和 $g_k^\dagger$ 对易$(k\neq 0)$:

$$[g_k,\hat{P}]=\int d^3r\psi_0[U_k-V_k]=0 \tag{10.5.58}$$

现在我们可以将式(10.5.52)精确写出. $\mathcal{H}$必须是双线性型,必须和$\hat{P}$对易,因此它的正确形式是:

$$\mathcal{H}=\frac{\alpha}{2}\hat{P}^2+\sum_{k\neq 0}\hbar\omega_k g_k^\dagger g_k. \tag{10.5.59}$$

零模代表了与整体相位不变性的自发破缺相联系的集体运动①, α 是待定参数. $\hat{P}$就是这个模的动量算符,它的正则共轭位置算符是

$$\hat{Q}=\mathrm{i}\int d^3r\Phi_0(\boldsymbol{r})[\sigma\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})-\delta\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{r})], \tag{10.5.60}$$

它们满足

$$[\hat{Q},\hat{P}]=\mathrm{i},[\hat{Q},g_k]=0\quad k\neq 0, \tag{10.5.61}$$

因此从式(10.5.59)可得

$$[\hat{Q},\mathcal{H}]=\mathrm{i}\alpha\hat{P}. \tag{10.5.62}$$

从这个要求得出以下结果:

$$2\int d^3r\Phi_0(\boldsymbol{r})\psi_0(\boldsymbol{r})=1, \tag{10.5.63}$$

$$\int d^3r\Phi_0(\boldsymbol{r})[U_k+V_k]=0 \text{ for } k\neq 0, \tag{10.5.64}$$

$$[\mathcal{L}+3u_0\rho(\boldsymbol{r})]\Phi_0(\boldsymbol{r})=\alpha\psi_0(\boldsymbol{r}). \tag{10.5.65}$$

---

① 参阅文献[43],第 10 6 节.

对应 JILA 阱参数的方程式(10.5.65)的解示于图 10.12.

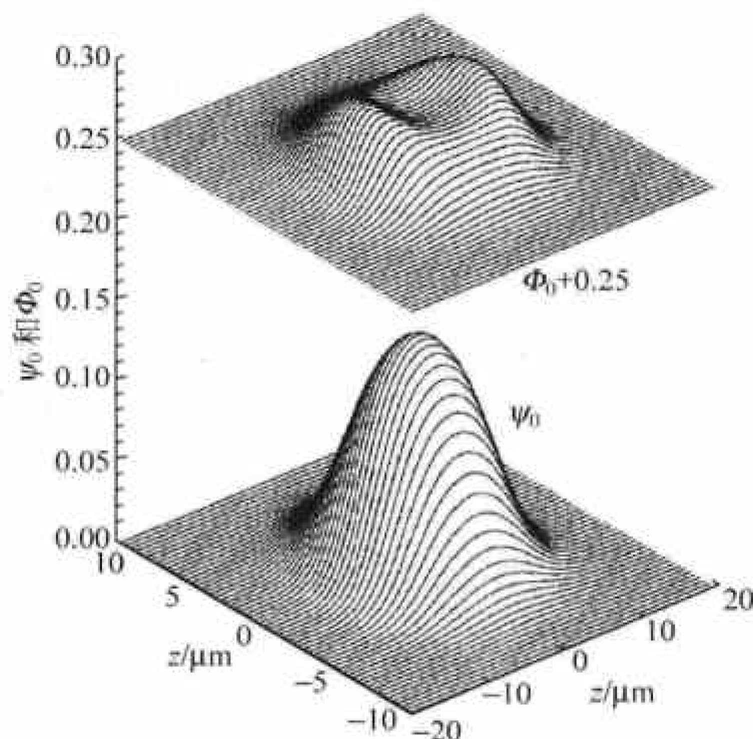


图 10.12 对应 JILA 阱参数的波函数 Φ_0 和 Ψ_0. 取自[42]
参数是：$N=2000, a=5.2\text{nm}, (\omega_x : \omega_y : \omega_z) = (1 : 1 : 8^{1/2})(10\text{Hz})$.
计算波函数的参数是：$\mu=1.769\ \hbar\omega_x, \alpha=1.129\ \hbar\omega_x$

以对易关系为指引，得到零模的湮灭和产生算符：

$$g_0 = \frac{\hat{P} - \mathrm{i}\,\hat{Q}}{\sqrt{2}}, g_0^\dagger = \frac{\hat{P} + \mathrm{i}\,\hat{Q}}{\sqrt{2}} \tag{10.5.66}$$

零模函数是：

$$U_0(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0(\boldsymbol{r}) + \Phi_0(\boldsymbol{r})), V_0(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0(\boldsymbol{r}) - \Phi_0(\boldsymbol{r})). \tag{10.5.67}$$

只有在把零模函数包括在内时，集合(U_k, V_k)才是完备的：

$$\sum_{k=0}^{\infty}[U_k(\boldsymbol{r})U_k^*(\boldsymbol{r}') - V_k(\boldsymbol{r})V_k^*(\boldsymbol{r}')] = \delta^3(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'), \tag{10.5.68}$$

$$\sum_{k=0}^{\infty}[U_k(\boldsymbol{r})V_k^*(\boldsymbol{r}') - V_k(\boldsymbol{r})U_k^*(\boldsymbol{r}')] = 0.$$

双正交归一条件式(10.5.51)现在延伸到包括 $k=0$. 量子涨落 $\delta\Psi$ 式(10.5.45)可以展开为

$$\delta\Psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{k=0}^{\infty}[U_k(\boldsymbol{r})g_k - V_k^*(\boldsymbol{r})g_k^\dagger]. \tag{10.5.69}$$

零模的贡献是

$$U_0 g_0 - V_0 g_0^\dagger = -\mathrm{i}\psi_0\,\hat{Q} + \Phi_0\,\hat{P}, \tag{10.5.70}$$

场算符的展开就是

$$\hat{\Psi}(\boldsymbol{r},t) = \sqrt{N}\psi_0(\boldsymbol{r}) - \mathrm{i}\psi_0\,\hat{Q} + \Phi_0\,\hat{P} + \sum_{k\neq 0}^{\infty}[U_k(\boldsymbol{r})g_k - V_k^*(\boldsymbol{r})g_k^\dagger]. \tag{10.5.71}$$

零模的动力学由运动方程决定. 从式(10.5.59)得到运动方程：

$$[\hat{P}, \mathcal{H}] = 0,$$

$$\mathrm{i}\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}=[\hat{Q},\mathcal{H}]=\mathrm{i}\alpha\hat{P}$$

它们的解是：

$$\hat{P}(t)=\hat{P}(0),\text{常数}. \tag{10.5.72}$$

$$\hat{Q}(t)=\hat{Q}(0)+\alpha\hat{P}(0)t. \tag{10.5.73}$$

10.6 各向导性势阱中的 Bose-Einstein 凝聚

BEc 的定态性质以及在形成后的演化，要靠 G. P. 方程的解给出. 由于方程的非线性，多靠数值解法[44,45]，但不用数值解仍能得到若干重要的定性结论(G. Baym, C. J. Pethick)[46]. 这项工作以 C. Wieman 和 E. Cornell 研究组对 ^{87}Rb 的 BEC 实验为例展开讨论. 势阱是各项异性的，轴向频率 ω°_z，横向频率 $\omega^\circ_\perp=\frac{\omega^\circ_z}{\sqrt{8}}$；相应的振子振幅为 $a_z=\left(\frac{\hbar}{m\omega^\circ_z}\right)^{1/2}$，$a_\perp=\left(\frac{\hbar}{m\omega^\circ_\perp}\right)^{1/2}$. 在无相互作用时，单粒子态波函数是

$$\Psi_0(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\pi^{3/4}a_\perp a_z{}^{1/2}}\exp\left[-\frac{1}{2\hbar}m(\omega^\circ_\perp r_\perp^2+\omega^\circ_z z^2)\right], \tag{10.6.1}$$

此处 $\boldsymbol{r}_\perp$ 是 $\boldsymbol{r}$ 在 xy 平面的投影. 密度分布 $\rho_0(\boldsymbol{r})=N\Psi_0^2(\boldsymbol{r})$ 是 Gauss 型的. ^{87}Rb 的散射长度是 $a\approx100a_0$，a_0 是 Bohr 半径，$a>0$ 意为相互作用是排斥. 单位体积气体的相互作用能是 $\frac{2\pi\hbar^2a}{m}|\rho(\boldsymbol{r})|^2$. 排斥作用使密度和理想气体情况相比要降低. 由于横向(xy 平面)势较弱，凝聚粒子数增加时，气体密度首先在 xy 平面内伸展，然后及于 z 轴方向，最终气体云的大小将取决于相互作用能与阱势能间的平衡. 暂时不考虑势的各向异性，设气体云半径为 R，则 ρ 约为 N/R^3. 每个粒子的振子势能为 $\frac{1}{2}m\omega_\perp^2R^2$，它感受到其他粒子的相互作用能约为 $\frac{4\pi\hbar^2a}{m}\frac{N}{R^3}$. 此二者之间的平衡给出

$$R^5=8\pi\frac{\hbar^2}{m^2\omega_\perp^2}aN=aa_\perp^4\,8\pi N\equiv a_\perp^5\,\zeta^5, \tag{10.6.2}$$

此处

$$\zeta=\left(\frac{8\pi Na}{a_\perp}\right)^{1/5} \tag{10.6.3}$$

是阱中 BEc 是无量纲尺度，BEc 的特征长度是 $a_\perp\zeta$. 在形成 BEc 后的实验条件下，$\zeta\gg1$. 粒子的平均动能是 $\overline{T}=\hbar^2/2mR^2$，故有动能与相互作用势能(或阱势能 $\overline{V}$)之比为

$$\frac{\overline{T}}{\overline{V}}\approx\frac{\hbar^2}{mR^2m\omega_\perp^2R^2}=\left(\frac{a_\perp}{R}\right)^4=\zeta^{-4},$$

它是很小的. 为了进一步考查相互作用的影响，用凝聚体波函数 $\boldsymbol{\Psi}$，它的归一化是 $\int|\Psi|^2\mathrm{d}^3r=N$. 单粒子 Hartree 波函数是 $\frac{\Psi(\boldsymbol{r})}{N^{1/2}}$，GPG 能量泛函是

$$E[\Psi(\boldsymbol{r})]=\int\mathrm{d}^3r\left\{\frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\Psi(\boldsymbol{r})|^2+\frac{m}{2}[(\omega^\circ_\perp)^2r_\perp^2+(\omega^\circ_z)^2z^2]|\Psi(\boldsymbol{r})|^2+\frac{2\pi\hbar^2a}{m}|\Psi(\boldsymbol{r})|^4\right\}. \tag{10.6.4}$$

作为第一级近似，取 Ψ 为元相互作用的基态波函数形式，但取有效频率 $\omega_{\perp}$ 和 ω_z 作为变分参量：

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = \pi^{-3/4}\omega_{\perp}^{1/2}\,\omega_z^{1/4}\left(\frac{m}{\pi\hbar}\right)^{3/4}\exp\left[-\frac{m}{2\hbar}(\omega_{\perp}r_{\perp}^2+\omega_z z^2)\right]. \tag{10.6.5}$$

将式(10.6.5)代入式(10.6.4)得到 $E(\omega_{\perp},\omega_z)$. 变 $\omega_{\perp}$ 求 E 极小，得极小条件 $\omega_{\perp}=\omega^{\circ}_{\perp}/\Delta$，此处 $\Delta\propto N^{1/2}a^{1/4}$. 和 Wieman-Cornell 组实验比较，对 $N=10^4$，得 $\omega_z/\omega^{\circ}_z=0.40\sim0.55$(取决于阱参数)，$\omega_{\perp}/\omega^{\circ}_{\perp}=0.16\sim0.26$. 由于排斥相互作用，波函数已有相当程度的扩展. 如果实验以后达到 $N=10^6$，扩展将更为可观.

对泛函(式(10.6.4))在 N 固定情况下求极小，就得 G. P. 方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{1}{2}m(\omega_{\perp}^{\circ 2}r_{\perp}^2+\omega_z^{\circ 2}z^2)+\frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\,|\,\Psi(\boldsymbol{r})\,|^2\right]\Psi(\boldsymbol{r})=\mu\Psi(\boldsymbol{r}), \tag{10.6.6}$$

μ 是化学势. 利用阱中 BEc 的特征长度 $a_{\perp}\zeta$ 可以定义无量纲长度 $\boldsymbol{r}_1$：$\boldsymbol{r}=a_{\perp}\zeta\boldsymbol{r}_1$. 方程(10.6.6)即可写作下列形式(记 $\lambda=\omega^{\circ}_z/\omega^{\circ}_{\perp}$)：

$$\left[-\frac{1}{\zeta^4}\nabla_1^2+r_{1\perp}^2+\lambda^2 z_1^2+|\,f(\boldsymbol{r}_1)\,|^2\right]f(\boldsymbol{r}_1)=\nu^2 f(\boldsymbol{r}_1), \tag{10.6.7}$$

其中

$$\nu^2=\frac{2\mu}{\zeta^2\,\hbar\omega^{\circ}_{\perp}}. \tag{10.6.8}$$

对足够大的 N 值，动能项可以忽略. 无量纲波函数 f 就可解出：

$$f(r_1^2)=\nu^2-r_{1\perp}^2-(\lambda z_1)^2, \tag{10.6.9}$$

解在左右方都为正值时成立，在此区域外 $f=0$.

试探波函数式(10.6.5)给出的动量分布 $\mathscr{F}(\boldsymbol{p})$ 是 Gauss 型的，即有

$$\mathscr{F}(\boldsymbol{p})=\left|\int d^3r\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{\hbar}\right)\Psi(\boldsymbol{r})\right|^2 \propto\exp\left[-\left(\frac{p_{\perp}^2}{\omega_{\perp}}+\frac{p_z^2}{\omega_z}\right)\Big/m\,\hbar\right], \tag{10.6.10}$$

动量平方平均值是

$$\langle p^2\rangle=\frac{m\hbar}{2}(\omega_z+2\omega_{\perp}). \tag{10.6.11}$$

将 BEC 动能相对于相互作用能和阱势能略去，就从 G. P. 方程式(10.6.6)直接得到

$$|\,\Psi(\boldsymbol{r})\,|^2=\begin{cases}\dfrac{m}{4\pi\hbar a}(\mu-V(\boldsymbol{r})) & \text{如 } \mu>V(\boldsymbol{r})\\ 0 & \text{其他情况}\end{cases} \tag{10.6.12}$$

这就是 Thomas-Fermi 近似，适用条件是 $Na/a_{\mathrm{HO}}\gg1$，$a_{\mathrm{HO}}=\sqrt{\hbar/m\bar{\omega}}$，$\bar{\omega}$ 为阱势的频率. S. Stringari[61] 用含时 G. P. 方程求得阱中 BEC 集体激发的模式. BEC 基态密度 $\rho_0=|\,\Psi_0(\boldsymbol{r})\,|^2$ 用 Thomas-Fermi 近似式(10.6.12)描述. 激发模式密度对基态有偏离 $\delta\rho$

$$\rho(\boldsymbol{r},t)=\rho_0(\boldsymbol{r})+\delta\rho(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}, \tag{10.6.13}$$

此处 ω 是待定的激发态频率. 将激发态定态波函数

$$\Psi(\boldsymbol{r},t)=\sqrt{\rho(\boldsymbol{r},t)}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta(\boldsymbol{r})}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu t/\hbar} \tag{10.6.14}$$

代入含时 G. P. 方程，就得到 Thomas-Fermi 近似下 Ψ 的实部和虚部所满足的两个方程：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla\cdot(\rho \boldsymbol{v}), \tag{10.6.15}$$

$$m\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \nabla\left(V + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}\rho - \mu\right) = 0, \tag{10.6.16}$$

此处

$$\boldsymbol{v} = \frac{\hbar}{m}\nabla\theta. \tag{10.6.17}$$

令 V 为各向同性谐振子势，

$$V = \frac{1}{2}m\omega_0^2 r^2. \tag{10.6.18}$$

将式(10.6.14)代入式(10.6.16)和式(10.6.17)并消去 $\boldsymbol{v}$，将 $\delta\rho$ 和 $\boldsymbol{v}$ 作为小量，就得到

$$\omega^2\delta\rho(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{2}\omega_0^2\nabla\cdot(R^2 - r^2)\nabla(\delta\rho), \tag{10.6.19}$$

此处 R 是 Thomas-Fermi 近似下 BEC 的半径，定义为

$$V(R) = \frac{m}{2}\omega_0^2 R^2 = \mu. \tag{10.6.20}$$

式(10.6.19)可以展开为球谐函数 $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ 求解，得到激发模的频率

$$\omega(n,l) = \omega_0(2n^2 + 2nl + 3n + l)^{\frac{1}{2}}, \tag{10.6.21}$$

此处 $n=1,2,3\cdots$；$l=0,1,2\cdots n-1$. Stringari 还求出各向异性阱中的激发模式，并用求和规则考虑了动能的影响.

容易理解，一个液滴，或者原子核，可以有这类集体激发，例如表面四级振动. 这里有意思的是，稀薄的 Bose 气体在发生 Bose-Einstein 凝聚后也能支持这类集体振动. 这在式(10.6.16)中已经可以看出，因为它是无旋流的流体动力学方程.

对各向异性的阱，且阱参数可以随时间变化的情况，Yu. Kagan，E. L. Surkov 和 G. V. Shlyapnikov[47]用局域密度近似并忽略动能项，发展了 G. P. 方程的普适标度解. 凝聚体波函数通过标度参数 $b_i(t)$ 表示，此处 $i=x,y,z$. $b_i(t)$ 满足的是经典运动方程，利用这种解可以讨论凝聚体在外界扰动以及阱参数变化情况下的演化.

10.7　涡旋及 Bose-Einstein 凝聚体的稳定性

BEc 形成的一个实验标志是涡旋的形成. 对 BEc 波函数 $\Psi = \sqrt{n(\boldsymbol{r})}\,e^{i\theta}$，式(10.3.8)给出超流体速度

$$\boldsymbol{v}_s = \frac{\hbar}{m}\nabla\theta,$$

它显然是无旋的：

$$\nabla\times\boldsymbol{v}_s = 0.$$

因此在一条涡旋线附近，沿方位角方向的速度场，其流体的速度大小与该点距涡旋线的距离 r 成反比，这样才能保证速度场的无旋，即沿图 10.13 封闭路径作 $\oint \boldsymbol{v}\cdot d\boldsymbol{s}$ 积分才能给出 0. 如果路径包括沿 z 轴的涡旋线在内，则涡旋量子化的条件式(10.3.9)

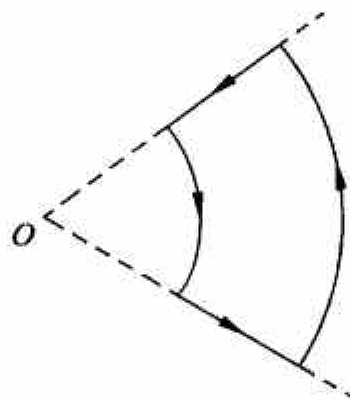


图 10.13　涡旋线 O 附近的积分路径

$$\oint \boldsymbol{v}_s \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s} = \frac{2\pi\hbar}{m}\kappa, \quad \kappa = 1, \pm 1; \pm 2, \cdots$$

给出量子数 κ 的状态波函数的相位 θ：

$$\theta = \kappa\phi, \tag{10.7.1}$$

此处 ϕ 是方位角. 理由是，梯度沿 ϕ 增加方向的分量是

$$\nabla_\phi = \hat{\phi}\frac{1}{r_\perp}\frac{\partial}{\partial\phi}, \tag{10.7.2}$$

$\hat{\phi}$ 是在 ϕ 增加方向的单位矢量. 因此

$$\boldsymbol{v} = \frac{\hbar}{m}\nabla\theta = \frac{\hbar\kappa}{mr_\perp}\hat{\phi}, \tag{10.7.3}$$

它正好给出量子化条件. 在量子数 κ 状态，BEc 在 z 方向的角动量是 $N\kappa\hbar$. 在超流液氦 ^{4}He 中曾观察到涡旋态的存在，气体 BEc 发现后各实验室都设法观测其中的涡旋态. 实验的重要性在于证实气体 BEc 的超流性质，因为在涡旋态中超流速度是和 BEc 序参量相位梯度成正比的，最初的努力是在蒸发冷却过程中使势阱略有变形并使势阱旋转，希望 BEc 就形成在涡旋态上. 这个方案没有得到肯定结果. J. E. Williams 和 M. J. Holland 提出建议[49]，利用 ^{87}Rb 的两种超精细结构态. 它们可以通过微波相互转变，各自由势阱约束. 两个阱的中心有小的距离，在微波作用时令两个阱围绕其中点以适当频率旋转. 实验开始时已形成一种态的 BEc(没有涡旋)，在微波作用一定时间后关闭微波并停止势阱旋转，结果可以产生相当数量的具有涡旋的第二种态的 BEc，与第一种态的 BEc 共存. 这个建议已由 E. Cornell 和 C. Wieman 的研究组实现[50]. K. W. Madison，F. chevy，W. Wolleben 和 J. Dalibard[51] 在轻度各向异性阱中的单种 BEc 得到了涡旋. 他们逐次得到 1 个，2 个，3 个，4 个涡旋. W. Ketterle 研究组也给出 BEc 超流的临界速度的证据，并得到许多涡旋组成三角晶格[52]. 至此，气态 BEc 的超流性质得到直接的实验证明.

F. Dalfavo 和 S. Stringari 研究了各向异性阱中 BEc 的涡旋态，发现它对相互吸引的 Bose 子系统形成 BEc 的稳定性有重要意义.

涡旋态波函数

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa\phi}$$

的梯度是

$$\nabla\Psi(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa\phi}\nabla\psi + \frac{\mathrm{i}\kappa}{r_\perp}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa\phi}\hat{\boldsymbol{\phi}}\psi, \tag{10.7.4}$$

右方第一项 $\nabla\psi$ 只有 $\hat{z}$ 及 $\hat{r}$ 方向的分量，因为 $\sqrt{n(\boldsymbol{r})}$ 只是 r 与 z 的函数. 因此

$$|\nabla\Psi|^2 = |\nabla\psi|^2 + \frac{\kappa^2}{r_\perp^2}|\psi|^2,$$

代入能量泛函就得到

$$E[\psi] = \int \mathrm{d}^3 r\left[\frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\psi|^2 + \frac{m}{2}\left(\omega_\perp^2 r_\perp^2 + \omega_z^2 z^2 + \frac{\hbar^2\kappa^2}{m^2 r_\perp^2}\right)|\psi(\boldsymbol{r})|^2 + \frac{2\pi\hbar^2 a}{m}|\psi(\boldsymbol{r})|^4\right]. \tag{10.7.5}$$

涡旋带来的正是"离心势"(角动量)项，在涡旋线上 ψ 为 0. F. Dalfovo 和 S. Stringari[48] 对此式作了数值计算，用了无量纲坐标 $\boldsymbol{r}_1 = \frac{1}{a_\perp}\boldsymbol{r}$，$z_1 = \frac{1}{a_\perp}z$，以及归一化为 1 的波函数 $\psi_1(\boldsymbol{r}_1)$ 和无

量纲能量 $E_1=(\hbar\omega_\perp)^{-1}E$. 计算步骤是，从试探波函数 $\psi_1(\boldsymbol{r}_1,t)$ 开始. 此处 t 是一个代表计算步骤的参数. 用 ψ_1 算出 E_1/N，然后取 Δt，作为下一个步骤，有

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi_1(\boldsymbol{r}_1,t)=-\frac{\bar{\delta}E_1/N}{\bar{\delta}\psi_1(\boldsymbol{r}_1,t)},$$

此处 $\bar{\delta}$ 代表维持归一化的受限泛函导数. 这个做法希望得到更小的 E_1/N. 这样重复下去，到 E_1/N 收敛时，它就是变分极小值. 图 10.14 给出 ^{87}Rb 无量纲波函数（用虚线代表），无相互作用情况，实线从上到下代表 $N=100,200,500,1000,2000,5000,10000$. 可以看出，相互作用对波函数扩展是有很大影响的，特别是在 xy 平面. 图 10.15 给出 ^{87}Rb BEc 波函数，虚线是无相互作用情况，实线是数值解，点划线是近似解（式(10.6.9)），可见在 $N=5000$ 时近似解已是相当好的. 图 10.16 给出涡旋的影响，图(a)画出无涡旋 $\kappa=0$ 情况，波函数用等值线标出，数字单位是任意的. 图(b)是 $\kappa=1$ 的情况，可见涡旋将波函数推离涡旋线.

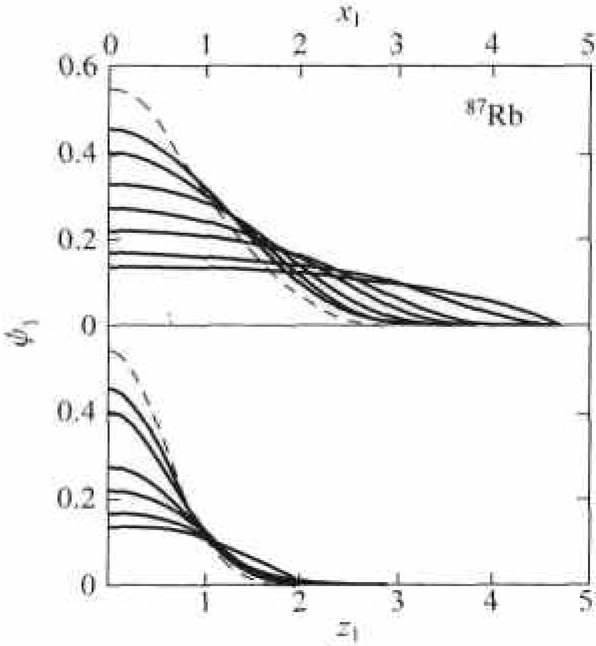


图 10.14　^{87}Rb BEc 的无量纲波函数，显示相互作用影响

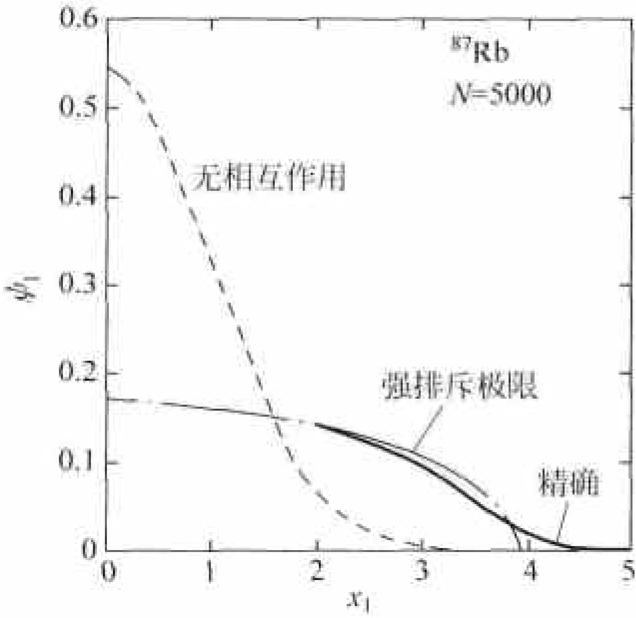


图 10.15　^{87}Rb BEc 波函数，数值解与近似解比较

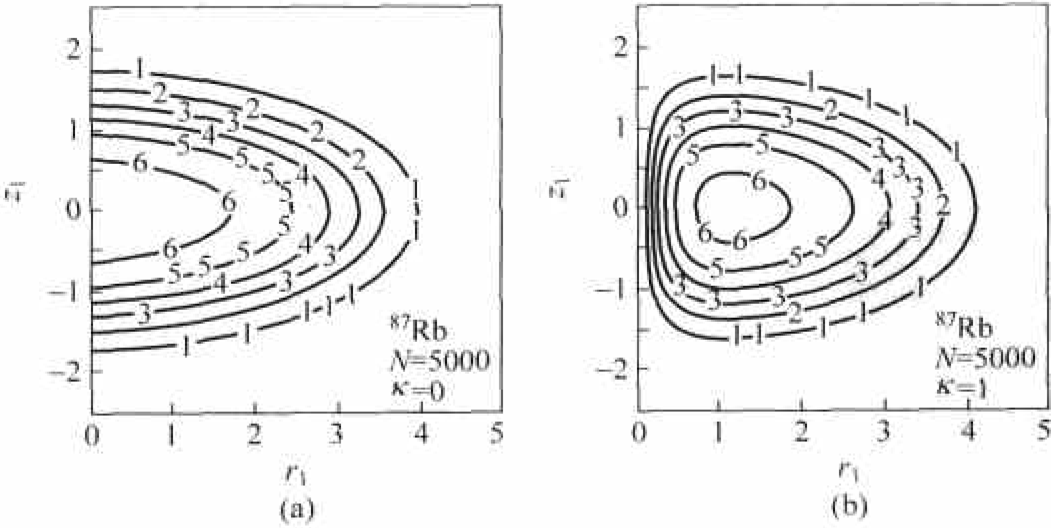


图 10.16　无涡旋波函数等值线(a)及 $\kappa=1$ 时波函数等值线(b)

有兴趣的是 ^{7}Li BEc 的计算. 它的 $a<0$，原子间是吸引力. 据式(10.4.37)，由于相互作用能与 a/v 成正比（v 是比体积），对 $a<0$ 的情况 v 会趋于 0，即均匀凝聚体要塌缩. 由于有

外场，提供了零点能，在 N 小于临界值时，BEc 有可能稳定. 以下的数值计算证实了这一点，且涡旋有助于使 $a<0$ 的 BEc 稳定. 计算结果示于图 10.17，虚线代表无相互作用的 BEc 波函数. 实线从下到上分别代表 $N=200,500,1000$. 随 N 增加波函数中心密度加大且在计算中收敛速度减慢. 到 $N>1400$ 时 E_1/N 就不再收敛. 涡旋的一个影响是把波函数推离涡旋线，见图 10.18(a)，另一影响是提高了 BEc 的稳定性. 图 10.18(b)给出不同的 N 值 κ 值时的波函数等值线. $\kappa=1$ 时 N 可达 4000，$\kappa=2$ 时可达 6500，$\kappa=3$ 时可达 8300 的稳定 BEc.

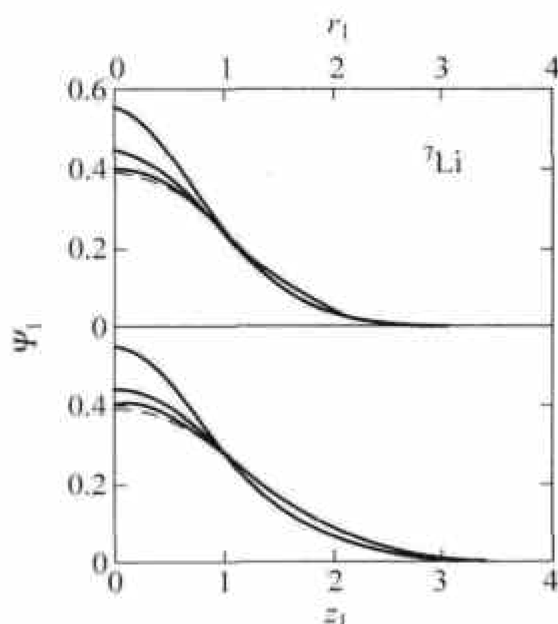


图 10.17 ^{7}Li BEc 波函数，显示相互作用影响

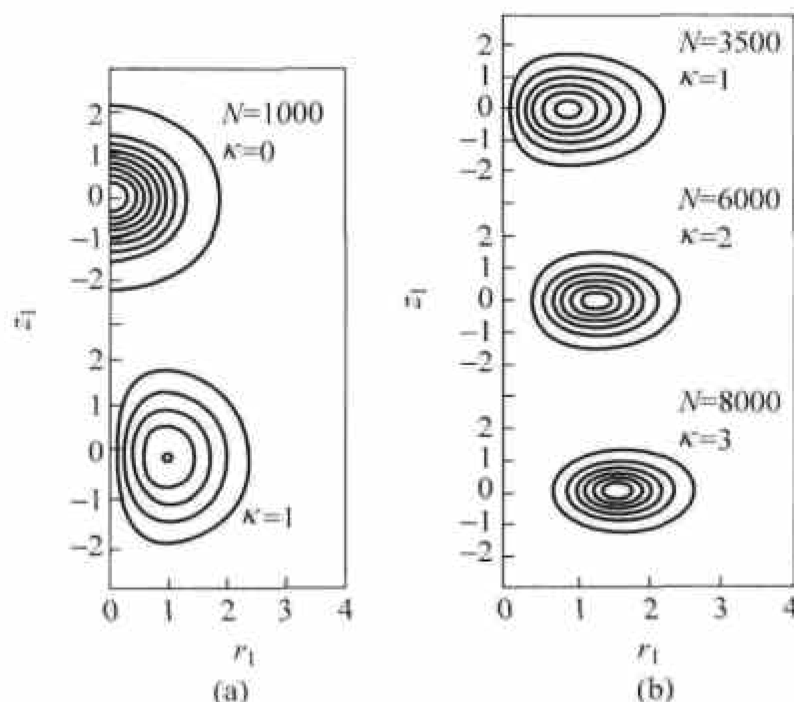


图 10.18 ^{7}Li BEc 波函数等值线

(a) 同 N 值无涡旋($\kappa=0$)与有涡旋($\kappa=1$)的比较；

(b) 不同 N 值与不同 κ 值的比较

用 G. P. 方程(含时的、定态的)研究过凝聚体的很多物理问题并取得一大批成果. 当然，它只能在 BEc 已形成情况下适用，但在此以前 BEc 是如何形成的显然是最有兴趣的问题. BEC 的动力学问题也有不少讨论，但到把问题搞清楚还有相当距离[54-57].

10.8 旋量凝聚体

光阱的使用[58]为阱中的凝聚体研究开辟了新的可能性. 在通常的磁阱中原子的自旋自由度被冻结了，因为只有一种或少数超精细结构态能被阱所局限. 一种自旋态被局限在阱中，原子就和没有自旋一样. 对(超精细)自旋为 1 的凝聚体的理论研究是从何天伦[59,60]开始的. 碱金属原子 ^{23}Na，^{39}K，^{87}Rb 的核自旋是 3/2，因此超精细自旋 f 可以是 1 或 2. 在能量上 $f=2$ 多重态的激发能远比阱的势能高. 在低温时两个 $f=1$ 的原子散射的结果仍然停留在 $f=1$ 多重态内. 因此可以只考虑 $f=1$ 的多重态，$m_f=-1,0,1$. 散射道可以有超精细自旋 0 或 2，超精细自旋 1 由于对称性要求被排除. 两个原子间的相互作用势是

$$V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)=\delta^3(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)\sum_{F=0,2}g_F\mathscr{P}_F, \tag{10.8.1}$$

此处 $g_F=4\pi\hbar^2a_F/M$，a_F 是散射长度，M 是原子质量，p_F 是超精细自旋 F 散射道的投影算符. 投影算符有以下性质：

$$\mathscr{P}_0+\mathscr{P}_2=1,\mathscr{P}_0\mathscr{P}_2=\mathscr{P}_2\mathscr{P}_0=0,\mathscr{P}_0^2=\mathscr{P}_0,\mathscr{P}_2^2=\mathscr{P}_2. \tag{10.8.2}$$

投影算符可以用原子 1 和 2 的超精细自旋算符 $\boldsymbol{F}_1$ 和 $\boldsymbol{F}_2$ 的标量积 $\boldsymbol{F}_1\cdot\boldsymbol{F}_2$ 表示. 因为 $\boldsymbol{F}_1\cdot\boldsymbol{F}_2=\frac{1}{2}[F(F+1)-2f(f+1)]$,所以有

$$\lambda_0\equiv\boldsymbol{F}_1\cdot\boldsymbol{F}_2\,|_{F=0}=-2,$$

$$\lambda_2\equiv\boldsymbol{F}_1\cdot\boldsymbol{F}_2\,|_{F=2}=1.$$

因此

$$\boldsymbol{F}_1\cdot\boldsymbol{F}_2=-2\mathscr{P}_0+\mathscr{P}_2.$$

用式(10.8.2)得到

$$\mathscr{P}_0=\frac{1}{3}(1-\boldsymbol{F}_1\cdot\boldsymbol{F}_2),\mathscr{P}_2=\frac{1}{3}(2+\boldsymbol{F}_1\cdot\boldsymbol{F}_2). \tag{10.8.3}$$

去掉式(10.8.1)中的 δ 函数,有

$$\begin{aligned}V&=g_0\,\frac{1}{3}(1-\boldsymbol{F}_1\cdot\boldsymbol{F}_2)+g_2\,\frac{1}{3}(2+\boldsymbol{F}_1\cdot\boldsymbol{F}_2)\\&=c_0+c_2\boldsymbol{F}_1\cdot\boldsymbol{F}_2,\end{aligned} \tag{10.8.4}$$

此处

$$c_0=\frac{1}{3}(g_0+2g_2),c_2=\frac{1}{3}(g_2-g_0). \tag{10.8.5}$$

旋量凝聚体的二次量子化的 Hamilton 量是

$$\begin{aligned}\mathcal{H}=\int\mathrm{d}^3r\Big[&\sum_a\left(\frac{\hbar^2}{2M}\right)\nabla\psi_a^\dagger\cdot\nabla\psi_a+\sum_a U\psi_a^\dagger\psi_a+\frac{c_0}{2}\sum_{a,a'}\psi_a^\dagger\psi_a^\dagger{}_{'}\psi_{a'}\psi_a\\&+c_2\sum_{aa'bb'}(\psi_a^\dagger\boldsymbol{F}\psi_b)\cdot(\psi_{a'}^\dagger\boldsymbol{F}\psi_{b'})\Big]\end{aligned} \tag{10.8.6}$$

此处 ψ_a 是湮灭超精细自旋分量为 $a(a=-1,0,1)$ 原子的场算符,U 是阱的势. 为方便起见,我们给出 $f=1$ 多重态的超精细自旋算符的矩阵形式($\hbar=1$):

$$\boldsymbol{F}_x=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\boldsymbol{F}_y=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix},\boldsymbol{F}_z=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix} \tag{10.8.7}$$

自旋的转动算符用 Euler 角(α,β,τ)表示:

$$\mathscr{U}(\alpha,\beta,\tau)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{F}_z\alpha}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{F}_y\beta}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{F}_z\tau} \tag{10.8.8}$$

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{F}_z\alpha}=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}&0&0\\0&1&0\\0&0&\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\end{pmatrix},\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{F}_z\tau}=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\tau}&0&0\\0&1&0\\0&0&\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\tau}\end{pmatrix},$$

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{F}_y\beta}=\begin{pmatrix}\cos^2\dfrac{\beta}{2}&-\dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta&-\cos^2\dfrac{\beta}{2}\\\dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta&\cos\beta&-\dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta\\-\cos^2\dfrac{\beta}{2}&\dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta&\cos^2\dfrac{\beta}{2}\end{pmatrix} \tag{10.8.9}$$

我们将要看到,基态结构、集体激发和涡旋结构依赖参数 g_0 和 g_2 有十分不同的性质.

10.8.1 基态结构

将凝聚体波函数写作

$$\Psi_a(\boldsymbol{r}) \equiv \langle \hat{\psi}_a(\boldsymbol{r}) \rangle = \sqrt{n(\boldsymbol{r})}\,\zeta_a(\boldsymbol{r}), \tag{10.8.10}$$

此处 n 是密度，ζ_a 是表征超精细自旋态 a 以及相位的归一化旋量，$\zeta^\dagger\zeta=1$. 基态由在粒子数确定的局限下使能量最小化的要求确定，$\delta(H-\mu N)=0$：

$$H-\mu N = \int \mathrm{d}^3 r\left(\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\sqrt{n})^2+\frac{\hbar^2}{2m}\mid\nabla\zeta_a\mid^2 n-[\mu-U(\boldsymbol{r})]n+\frac{n^2}{2}[c_0+c_2\langle \boldsymbol{F}\rangle^2]\right), \tag{10.8.11}$$

此处

$$\langle \boldsymbol{F}\rangle = \zeta_a^\dagger \boldsymbol{F}\zeta_a.$$

所有的旋量都由规范变换和自旋转动式(10.8.8)相联系，在能量上都是简并的. 有两种不同的情况：

(1) 极态(polar state)[①]

对 $g_2>g_0$，有 $c_2>0$. 从式(10.8.11)可以看出能量极小化的条化是$\langle \boldsymbol{F}\rangle^2=0$. 这可以通过选择超精细自旋分量 $m_f=0$ 态来达到：

对于这个态，$\langle \boldsymbol{F}_x\rangle=\langle \boldsymbol{F}_y\rangle=\langle \boldsymbol{F}_z\rangle=0$. 对它使用自旋转动，得到

$$\zeta = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\mathcal{U}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\begin{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\sin\beta\\ \cos\beta\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\sin\beta\end{pmatrix}. \tag{10.8.12}$$

$H-\mu N$ 的最小化给出

$$\delta\langle H-\mu N\rangle = \int \mathrm{d}^3 r\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\nabla^2\sqrt{n}}{\sqrt{n}}-[\mu-U(\boldsymbol{r})]+c_0 n\right]\delta n = 0,$$

它导致基态密度

$$n^0(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{c_0}[\mu-U(\boldsymbol{r})-W(\boldsymbol{r})], \tag{10.8.13}$$

此处

$$W(r) = \frac{\hbar^2}{2M}\frac{\nabla^2\sqrt{n^0}}{\sqrt{n^0}}. \tag{10.8.14}$$

注意式 ζ(10.8.12)是和 Euler 角 τ 无关的. 因此极态的对称群是 $U(1)\times S^2$，此处 $U(1)$是指相角 θ，S^2 是指单位球面，自旋量子化轴的方向由球面上的点(α,β)决定.

---

① 这个名称是从液体^{3}He 的极态类比采用的.

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}$$

(2) 铁磁态：

对 $g_2<g_0$，有 $c_2<0$. 能量最小化要求 $\langle \boldsymbol{F}\rangle^2=1$. 选择超精细自旋分量 $m_f=1$ 就能做到. 更普遍可以选

$$\zeta = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\mathcal{U}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\theta-\tau)}\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\cos^2\dfrac{\beta}{2}\\ \sqrt{2}\cos\dfrac{\beta}{2}\sin\dfrac{\beta}{2}\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\sin^2\dfrac{\beta}{2}\end{bmatrix}. \tag{10.8.15}$$

在计算 $\delta(H-\mu N)$ 时注意到和 n^2 成正比的那一项是 $n^2(c_0+c_2)/2=n^2g_2/2$. 最后得到

$$n^0(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{g_2}[\mu-U(\boldsymbol{r})+W(\boldsymbol{r})]. \tag{10.8.16}$$

自旋的方向是 $\langle \boldsymbol{F}\rangle=\cos\beta\hat{\boldsymbol{z}}+\sin\beta(\cos\alpha\,\hat{\boldsymbol{x}}+\sin\alpha\,\hat{\boldsymbol{y}})$. 在式(10.8.15)中相角的组合 $(\theta-\tau)$ 显示一个定域"自旋-规范"对称性①. 铁磁态的对称群是 $SO(3)$. 对称性的不同会导致涡旋性质的根本不同. ^{23}Na 和 ^{87}Rb 分别是极态和铁磁态.

10.8.2 阱中旋量凝聚体的集体模

Hamilton 量(式(10.8.6))给出场算符的运动方程

$$\mathrm{i}\,\hbar\partial_t\hat{\psi}_m = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\hat{\psi}_m+[U(r)-\mu]\hat{\psi}_m+c_0\sum_a(\hat{\psi}_a^\dagger\hat{\psi}_a)\hat{\psi}_m+c_2\sum_{a,b}(\hat{\psi}_a^\dagger\boldsymbol{F}\hat{\psi}_b)\cdot\boldsymbol{F}\hat{\psi}_m. \tag{10.8.17}$$

要探讨元激发，将场算符写作 $\hat{\Psi}_m=\Psi^0+\hat{\phi}_m$ 并将方程(10.8.17)在基态 Ψ^0 附近线性化.

(1) 极态：

取 $\Psi^0=\sqrt{n}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}$，用式(10.8.13)和 $\langle \boldsymbol{F}\rangle=0$，式(10.8.17)就给出量子涨落 $\hat{\phi}$ 所满足的方程：

$$\mathrm{i}\,\hbar\partial_t\begin{pmatrix}\hat{\phi}_0\\-\hat{\phi}_0^\dagger\end{pmatrix} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\begin{pmatrix}\hat{\phi}_0\\\hat{\phi}_0^\dagger\end{pmatrix}+W(\boldsymbol{r})\begin{pmatrix}\hat{\phi}_0\\\hat{\phi}_0^\dagger\end{pmatrix}+n^0c_0\begin{pmatrix}\hat{\phi}_0+\hat{\phi}_0^\dagger\\\hat{\phi}_0+\hat{\phi}_0^\dagger\end{pmatrix}, \tag{10.8.18}$$

$$\mathrm{i}\,\hbar\partial_t\begin{pmatrix}\hat{\phi}_1\\-\hat{\phi}_{-1}^\dagger\end{pmatrix} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\begin{pmatrix}\hat{\phi}_1\\\hat{\phi}_{-1}^\dagger\end{pmatrix}+W(\boldsymbol{r})\begin{pmatrix}\hat{\phi}_1\\\hat{\phi}_{-1}^\dagger\end{pmatrix}+n^0c_2\begin{pmatrix}\hat{\phi}_1+\hat{\phi}_{-1}^\dagger\\\hat{\phi}_1+\hat{\phi}_{-1}^\dagger\end{pmatrix}. \tag{10.8.19}$$

在线性化中，代入

$$\hat{\psi}^\dagger\hat{\psi}\to\Psi^{0*}\hat{\phi}+\hat{\phi}^\dagger\Psi^0$$

并考虑到 $\Psi^0\propto\zeta_0$ 因而只有 $\hat{\phi}_0$ 和 $\hat{\phi}_0^\dagger$ 对密度涨落有贡献：

$$\delta\,\hat{n}(\boldsymbol{r}) = \sqrt{n^0(\boldsymbol{r})}(\hat{\phi}_0+\hat{\phi}_0^\dagger).$$

---

① 令凝聚体的波函数为 $\Psi_m(\vec{r},t)=\zeta_m(\vec{r},t)\Phi(\vec{r},t)$，此处 m 是沿量子化轴 $\hat{n}$ 的超精细自旋分量. 在 Ψ 上作用的定域规范变换 $e^{\mathrm{i}\alpha(\vec{r},t)}$ 可以被一个定域自旋转动 $e^{-\mathrm{i}\alpha(\vec{r},t)\hat{n}\cdot\vec{F}/F}$ 所抵消. 所以被称为定域规范-自旋对称性.

自旋涨落是

$$\delta\hat{M}_+ \equiv \delta(\hat{M}_x + \mathrm{i}\hat{M}_y) = \sqrt{n^0(\boldsymbol{r})}(\hat{\phi}_1 + \hat{\phi}_{-1}^\dagger),$$

$$\delta\hat{M}_- = \delta\hat{M}_+^\dagger.$$

记激发模 $\hat{\phi}_0$ 和 $\hat{\phi}_\pm$ 的频率为 ω_0 和 $\omega_\pm$，并将 $\phi \propto \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}$ 代入方程(10.8.18)和(10.8.19)，就得到一组耦合线性齐次方程. 方程具有非零解的条件导致(在忽略 W 条件下)

$$\hbar\omega_0 = \sqrt{\varepsilon_k(\varepsilon_k + 2c_0 n_0)}, \hbar\omega_\pm = \sqrt{\varepsilon_k(\varepsilon_k + 2c_2 n_0)},$$

此处 $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2/2M$. 在谐振子阱中，方程(10.8.18)和标量凝聚体的集体激发方程相同. 忽略 W 并用 Thomas-Fermi 近似 $n^0(\boldsymbol{r}) = [\mu - U(\boldsymbol{r})]/c_0$，方程(10.8.18)和方程(10.8.19)可以写为

$$\partial_t\delta\hat{n} = \nabla(c_0 n^0\nabla\delta\hat{n}), \quad \partial_t\delta\hat{M}_\pm = \nabla(c_2 n^0\nabla\delta\hat{M}_\pm). \tag{10.8.20}$$

注意到自旋波模式满足和密度模式同样的方程，只需将 c_0 换为 c_2，因此自旋模式的量子数和波函数与密度模式的完全相同，它们的频率关系是

$$\omega_\pm^2 = \frac{c_2}{c_0}\omega_0^2 = \frac{a_2 - a_0}{2a_2 + a_0}\omega_0^2. \tag{10.8.21}$$

(2) 铁磁态：

取 $\boldsymbol{\Psi}^0 = \sqrt{n}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}$，并用 $\langle\boldsymbol{F}\rangle = \hat{\boldsymbol{z}}$，将 $\hat{\Psi}_m = \boldsymbol{\Psi}^0 + \hat{\phi}_m$ 代入方程(10.8.17)，得到

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\begin{pmatrix}\hat{\phi}_1\\\hat{\phi}_0\\\hat{\phi}_{-1}\end{pmatrix} = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\begin{pmatrix}\hat{\phi}_1\\\hat{\phi}_0\\\hat{\phi}_{-1}\end{pmatrix} + W(\boldsymbol{r})\begin{pmatrix}\hat{\phi}_1\\\hat{\phi}_0\\\hat{\phi}_{-1}\end{pmatrix} + n^0\begin{pmatrix}g_2(\hat{\phi}_1 + \hat{\phi}_1^\dagger)\\0\\2|c_2|\hat{\phi}_{-1}\end{pmatrix} \tag{10.8.22}$$

准到 $\hat{\phi}$ 的线性项，密度、自旋和"四极自旋涨落"分别是 $\delta\hat{n} = \sqrt{n_0}(\hat{\phi}_1 + \hat{\phi}_1^\dagger)$，$\delta\hat{M}_- = \sqrt{n_0}\hat{\phi}_0^\dagger$ 和 $\delta\hat{M}_-^2 = 2\sqrt{n_0}\hat{\phi}_{-1}^\dagger$. 在均匀情况，$(W=0)$ 这些模式的频率分别是 $\hbar\omega_1 = \sqrt{\varepsilon_k(\varepsilon_k + 2g_2 n_0)}$ (Bogoliubov 谱)，$\hbar\omega_0 = \varepsilon_k$(自由粒子谱)和 $\hbar\omega_{-1} = \varepsilon_k + 2c_2 n_0$(类似自由粒子谱，有能隙).

10.8.3 铁磁态涡旋的内在稳定性

超流体速度是 $\boldsymbol{v}_s = \dfrac{\hbar}{M}\zeta^\dagger\nabla\zeta$. 现在容许 Euler 角随位置变化，这是"自旋织构"(spin texture)情况. 超流体速度就是

$$\boldsymbol{v}_s = \frac{\hbar}{M}\nabla\theta, \text{(极态情况)}$$

$$\boldsymbol{v}_s = \frac{\hbar}{M}[\nabla(\theta - \tau) - \cos\beta\nabla\alpha], \text{(铁磁态情况)} \tag{10.8.23}$$

铁磁态的超流体速度与极态时不同，在于它和自旋转动有关. 这就导致铁磁态涡旋的有趣性质. 如果过多的涡旋能量存储在一个自旋分量，体系可以通过自旋转动来摆脱它，这样的涡旋是不稳定的. 我们来演示一下，选定一个状态：$\tau = 0$，$-\alpha = \theta = m\phi$(m 是正整数)，$\beta = \pi t$ (t 是从 0 到 1 变化的参数). 这个状态由下式描述：

$$\Psi(t)=\sqrt{n^0}\begin{pmatrix} e^{i2m\phi}\cos^2\left(\frac{\pi t}{2}\right) \\ e^{im\phi}\sqrt{2}\sin\frac{\pi t}{2}\cos\frac{\pi t}{2} \\ \sin^2\frac{\pi t}{2} \end{pmatrix}. \tag{10.8.24}$$

从在$\hat{z}$方向量子数为 $2m$ 的涡旋开始：

$$\zeta(t=0)=\begin{pmatrix} e^{i2m\phi} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

通过局域地变化 Euler 角 β(t 从 0 变到 1)让这个状态连续变化到

$$\zeta(t=1)=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

这表征一个自旋为-1 的没有涡旋的凝聚体. 态(10.8.24)的自旋织构是

$$\langle \boldsymbol{F}\rangle=\cos(\pi t)\,\hat{\boldsymbol{z}}+\sin(\pi t)[\cos(m\phi)\,\hat{\boldsymbol{x}}+\sin(m\phi)\,\hat{\boldsymbol{y}}].$$

可见环流量子数为 $2m$ 的涡旋是拓扑不稳定的. 将式(10.8.24)乘以 $e^{i\phi}$，就得到对另一个态 t 的演化

$$\zeta(0)=\begin{pmatrix} e^{i(2m+1)\phi} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}\longrightarrow \zeta(1)=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix}, \tag{10.8.25}$$

这表征了一个在$\hat{z}$方向的 $2m+1$ 涡旋演化为一个在$-\hat{z}$方向的单位涡旋. 单位环流涡旋对自旋织构的变化是稳定的. 极态和铁磁态的区别源于它们的第一同伦群，$\Pi_1(U(1)\times S^2)=Z$ 和 $\Pi_1(SO(3))=Z_2$. 极态相角有无穷多的具有不同环绕数的缺陷，铁磁态相角只有一个具有非平庸环绕数的缺陷.

10.8.4 无核的涡旋

考虑一个凝聚体

$$\zeta=\begin{pmatrix} \cos^2\frac{\beta}{2} \\ \sqrt{2}e^{i\phi}\sin\frac{\beta}{2}\cos\frac{\beta}{2} \\ e^{2i\phi}\sin^2\frac{\beta}{2} \end{pmatrix},$$

此处 $\beta(r)$是一个 r 的增函数，在 $r=0$ 处有 $\beta=0$. 这个凝聚体的自旋织构和超流体速度都是圆柱对称的：$\langle \boldsymbol{F}\rangle=\hat{\boldsymbol{z}}\cos\beta+\sin\beta(\cos\alpha\,\hat{\boldsymbol{x}}+\sin\alpha\,\hat{\boldsymbol{y}})$ 和 $\boldsymbol{v}_s=\frac{\hbar}{mr}(1-\cos\beta)\hat{\boldsymbol{\phi}}$. 当 $\beta(r)$到达 $\pi/2$ 时，$\boldsymbol{v}_s$ 是超流体速度，但当 $r\to 0,\beta\to 0$ 时，超流体速度并不发散而趋于零. 自旋织构、拓扑不稳定性和超流体速度和超流^{3}He 的 A-相极为相似.

10.8.5 碎裂的凝聚体

前面的讨论是基于平均场理论的. 如果超出平均场理论我们就有可能探索具有内在自

由度的玻色子体系的有趣的性质.我们根据文献[96]讨论自旋为1的玻色体系的碎裂以及单一凝聚体问题.在外磁场内的自旋为1的玻色气体的Hamilton量为:

$$\hat{H}=\int\hat{\psi}_{\mu}^{*}\left(-\frac{\hbar^{2}}{2m}\delta_{\mu\nu}\nabla^{2}-\gamma\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{F}_{\mu\nu}\right)\hat{\psi}_{\nu}\mathrm{d}^{3}r+\frac{1}{2}\int\hat{\psi}_{\mu}^{\dagger}\hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}\hat{\psi}\beta\hat{\psi}_{\nu}(c_{0}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\mu\nu}+c_{2}\boldsymbol{F}_{\mu\nu}\cdot\boldsymbol{F}_{\alpha\beta})\mathrm{d}^{3}r. \tag{10.8.26}$$

场算符 $\hat{\psi}_{\mu}$ 可以展开为

$$\hat{\psi}_{\mu}=\frac{1}{\Omega^{1/2}}\sum_{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}a_{\mu}(\boldsymbol{k}), \tag{10.8.27}$$

此处 Ω 为体系的体积.我们将 $a_{\mu}(0)$ 简单地表示为 a_{μ},$\hat{H}$中仅含 a_{μ} 的部分表示为$\hat{H}_{0}$.

$$\hat{H}=\hat{H}_{0}+\hat{H}',$$

$$\hat{H}_{0}=\frac{c_{2}}{2\Omega}(F^{2}-2N)-\gamma\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{F}+\frac{c_{0}}{2\Omega}N(N-1). \tag{10.8.28}$$

此处 $\boldsymbol{F}=a_{\mu}^{\dagger}\boldsymbol{F}_{\mu\nu}a_{\nu}$,$N=a_{\mu}^{\dagger}a_{\mu}$. $\hat{H}_{0}$ 用来研究基态(凝聚体),$\hat{H}'$则给出凝聚体的贫化.我们将$\hat{H}_{0}$的基态表示为$|F\rangle$.从式(10.8.28)可以得出:

$$|F\rangle=|F=S,F_{z}=S\rangle. \tag{10.8.29}$$

此处 S 是使下式得以极小化的整数:

$$\langle\hat{H}_{0}\rangle_{F}=\frac{c_{2}}{2\Omega}S(S+1)-\gamma BS+\frac{c_{0}}{2\Omega}N(N-1)-\frac{c_{2}N}{\Omega}. \tag{10.8.30}$$

在详细讨论本征态的性质之前,应该提一下 Law,Pu 和 Bigelow 的一篇论文[97].他们首先超越平均场方法研究 $S=1$ 旋量凝聚体基态的性质.在没有外磁场情况下,Hamilton 量可以由式(10.8.28)给出.与自旋有关的部分是:

$$\hat{H}_{a}=\frac{c_{2}}{2\Omega}[S(S+1)-2N]. \tag{10.8.31}$$

对于 $c_{2}>0$ 情况,基态是 $|F\rangle=|0,0\rangle$,本征值是 $E_{a}=-c_{2}N/\Omega$.用 Fock 态 $|N_{1},N_{0},N_{-1}\rangle$来展开$|F\rangle$,结果是:

$$|F\rangle=\sum_{k=0}^{[N/2]}A_{k}\,|k,N-2k,k\rangle. \tag{10.8.32}$$

文献[97]给出展开系数 A_{k} 的递推公式.$|F\rangle$态各分量的平均粒子数都相等:$\langle N_{1}\rangle=\langle N_{0}\rangle=\langle N_{-1}\rangle=N/3$. A_{k} 对于 k 的分布几乎是均匀的,因此粒子数涨落极大,虽然总粒子数是固定的.论文作者指出,这类超 Poisson 的粒子数分布对于反铁磁的低能量本征态是常见的.这样的状态被作者称为“集体的自旋状态”,因为它不能被表示为个别原子波函数的乘积.

对于 $c_{2}<0$ 情况,体系有 $2N+1$ 个简并基态

$$|F\rangle_{m_{l}}=|N,m_{l}\rangle,\quad m_{l}=0,\pm1\cdots\pm N, \tag{10.8.33}$$

本征值是 $E_{a}=\frac{c_{2}}{2\Omega}N(N-1)$.将态用 Fock 态展开,有

$$|N,m_{l}\rangle=\sum_{k}B_{k}^{(m_{l})}\,|k+m_{l},N-2k-m_{l},k\rangle. \tag{10.8.34}$$

分布 $B_{k}^{(m_{l})}$ 是亚 Poisson 的,它的宽度随 m_{l} 的增加而减小.在文献[97]中给出了 A_{k} 和 B_{k} 的

典型曲线图.

我们现在回到文献[96]的基态式(10.8.29),集中考虑有磁场存在的 $c_2>0$ 情况. 要了解这个态的结构和性质,我们先注意到由于 Bose 统计,自旋为 1 的 Bose 气体的多体单态是唯一的;这是因为将任意两个 Bose 子交换所得的状态和交换前是完全相同的. 产生一个单态的对的算符是

$$\Theta^{\dagger}=-2a_1^{\dagger}a_{-1}^{\dagger}+a_0^{\dagger 2}. \tag{10.8.35}$$

基态 $|F\rangle=|S,S\rangle$ 是由 S 个 $f_z=1$ 的 Bose 子和 $(N-S)/2$ 个单态对所组成,即为

$$|S,S\rangle=\frac{1}{\sqrt{f(Q,S)}}a_1^{\dagger S}\Theta^{\dagger\frac{N-S}{2}}|vac\rangle. \tag{10.8.36}$$

归一化因子 $f(Q,S)$ 在文献[96]中给出:

$$f(Q,S)=S!Q!2^Q\frac{(2Q+2S+1)!!}{(2S+1)!!} \tag{10.8.37}$$

$|F\rangle$ 的单粒子密度矩阵式对角的:

$$(\hat{\rho}^F)_{\alpha\beta}=\langle a_\beta^{\dagger}a_\alpha\rangle_F=N_\alpha\delta_{\alpha\beta}, \tag{10.8.38}$$

其中

$$N_1=\frac{N(S+1)+S(S+2)}{2S+3},N_0=\frac{N-S}{2S+3},N_{-1}=\frac{(N-S)(S+1)}{2S+3}. \tag{10.8.39}$$

为了表征体系,只靠单粒子密度矩阵是不够的. 两个体系可以有完全相同的单粒子密度矩阵,但它们的二粒子关联则可以完全不同. 我们注意到因为有恒等式 $\hat{N}_{-1}=\hat{N}_1-S$(因为在单态对中 $+1$ 分量和 -1 分量数量相同)以及 $\hat{N}_0=N+S-2\hat{N}_1$,所有的二粒子关联都可以用 $(\Delta\hat{N}_1)^2\equiv\langle(a_1^{\dagger}a_1-\langle a_1^{\dagger}a_1\rangle^2)\rangle=\langle(a_1^{\dagger}a_1)^2\rangle-\langle a_1^{\dagger}a_1\rangle^2$ 表示. 例如 $(\Delta\hat{N}_1)^2=(\Delta\hat{N}_0)^2/4=(\Delta\hat{N}_{-1})^2$, $\langle\hat{N}_0\hat{N}_{-1}\rangle=\langle\hat{N}_1\rangle(N+3S)-2\langle\hat{N}_1^2\rangle SN-S^2$,等等. 用式(10.8.37)可以证明

$$(\Delta\hat{N}_1)^2=\left(\frac{N}{2S+3}\right)^2\left(\frac{S+1}{2S+5}\right)+\left(\frac{3N}{(2S+3)^2}\right)\left(\frac{S+1}{2S+5}\right)+\left(\frac{S+1}{2S+5}\right)\left(\frac{S^2-3S}{(2S+3)^2}\right). \tag{10.8.40}$$

态 $|F\rangle=|S,S\rangle$ 的性质与磁化度 S/N 有关. 对于 $S=0$,就得到 Law, Pu 和 Bigelow 最早研究的 $|0,0\rangle$ 态[97],它的三个分量平均粒子数相同: $N_1=N_0=N_{-1}=N/3$,并且具有巨大的粒子数涨落 $\Delta N_\alpha\sim N$. 当 S 的值增加时,N_0 和 ΔN_0 迅速减小.

当 S 变为宏观量时,N_0 和 ΔN_0 都变为 $O(1)$ 量级,即在热力学极限时为零,而 $N_{\pm1}=(N\pm S)/2$ 仍保持为宏观量. 态 $|F\rangle$ 代表碎裂的凝聚体,因为单粒子密度矩阵对于任何磁化值都具有不止一个宏观本征值. 设定 Poisson 分布 $\Delta N\sim\sqrt{N}$ 作为"超碎裂态"($\Delta N_\alpha\sim N$)到"相干碎裂态"($\Delta N_\alpha\sim 1$)过渡的界限,式(10.8.40)给出,对于 $N.S\gg1$,过渡发生在 $S/N<1/\sqrt{8N}$. 因此,超碎裂只能在 S/N 很小时才能达到,而相干碎裂则易于实现而经常出现.

考虑大 S 值的 $N_0=0$ 相干碎裂:

$$N_{\pm1}=\frac{N\pm S}{2},\ N_0=0.$$

$$|C\rangle=\frac{1}{\sqrt{N!}}\left(\sqrt{\frac{N_1}{N}}a_1^{\dagger}+\sqrt{\frac{N_{-1}}{N}}a_{-1}^{\dagger}\right)^N|vac\rangle. \tag{10.8.41}$$

这个态可以用 Fock 态来近似：

$$|S,S\rangle \to |N_1,0,N_{-1}\rangle = \frac{a_1^{\dagger N_1} a_{-1}^{\dagger N_{-1}}}{\sqrt{N_1!N_{-1}!}}|vac\rangle. \tag{10.8.42}$$

在 Fock 态空间内(总粒子数固定)$\hat{H}_0$ 可以写为

$$\hat{H}_0 = \frac{c_2}{2\Omega}(N_1 - N_{-1})^2 - \gamma B(N_1 - N_{-1}). \tag{10.8.43}$$

态式(10.8.42)标明相当于在算符 Θ 内去掉 a_0. 这可以理解为对于大的 N 值的 Bose 增强：在具有 N 个 Bose 子的状态上再加一个 Bose 子的过程伴随有 $\sqrt{N+1}$ 因子. 将态(10.8.42)与下面的单一凝聚体状态相比较是有启发意义的：

$$|C\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\left(\sqrt{\frac{N_1}{N}}a_1^\dagger + \sqrt{\frac{N_{-1}}{N}}a_{-1}^\dagger\right)^N |vac\rangle. \tag{10.8.44}$$

$|C\rangle$的单粒子密度矩阵是：

$$\hat{\boldsymbol{\rho}}^C = \begin{bmatrix} N_1 & \sqrt{N_1N_{-1}} \\ \sqrt{N_1N_{-1}} & N_{-1} \end{bmatrix}. \tag{10.8.45}$$

和态$|F\rangle$的单粒子密度矩阵比较：

$$\hat{\boldsymbol{\rho}}^F = \begin{bmatrix} N_1 & 0 \\ 0 & N_{-1} \end{bmatrix}. \tag{10.8.46}$$

我们注意到，算符 $a_\mu^\dagger a_0$ 的期望值将会出现在密度矩阵的非对角元位置上，它在作用于一个自旋状态时会改变自旋分量的值. 因此碎裂态的密度矩阵没有非对角元的根源就是自旋守恒. 这启发我们，可以改变自旋分量的磁场梯度能通过产生非对角元来恢复一个凝聚体的相相干.

考虑以下的外磁场：

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = B_0(\hat{\boldsymbol{z}} + G'[x\hat{\boldsymbol{x}} - z\hat{\boldsymbol{z}}]), \tag{10.8.47}$$

其中 G'表征磁场梯度的强度. 进行一个导致选择局域场的方向作为量子化轴的幺正变换，Hamilton 量变为[96]：

$$\widetilde{H}_0 = -\frac{e}{2}(a_1^\dagger a_{-1} + H.c.) + \frac{c_2}{2\Omega}(N_1 - N_{-1})^2 - \gamma B(N_1 - N_{-1}). \tag{10.8.48}$$

此处出现了改变自旋分量的算符 $a_1^\dagger a_{-1} + H.c.$，以及 $e = \hbar^2 G'^2/2M$. $\widetilde{H}_0$ 的基态是[96]

$$|\psi\rangle = (\pi\eta^2)^{-1/4}\sum_{l=-N_1}^{N_{-1}} \mathrm{e}^{-l^2/2\eta^2}\mathrm{e}^{\xi l}|l\rangle. \tag{10.8.49}$$

此处$|l\rangle = |N_1 + l, N_0, N_{-1} - l\rangle$，$\eta^4 = c\sqrt{N_1N_{-1}}\,\Omega/4c_2$，$\xi = (N_{-1}^{-1} - N_1^{-1})/4$. 这个态的密度矩阵是

$$\hat{\boldsymbol{\rho}}_\psi = \begin{bmatrix} N_1 & \sqrt{N_1N_{-1}}\,\mathrm{e}^{-1/4\eta^2} \\ \sqrt{N_1N_{-1}}\,\mathrm{e}^{-1/4\eta^2} & N_{-1} \end{bmatrix}. \tag{10.8.50}$$

它的本征值是：

$$\lambda_\pm = \frac{1}{2}\left[N \pm \sqrt{N^2\mathrm{e}^{-1/2\eta^2} + S^2(1 - \mathrm{e}^{-1/2\eta^2})}\right]. \tag{10.8.51}$$

对零场梯度，$\eta\to 0$，$\lambda_\pm\to\frac{1}{2}(N\pm S)$，凝聚体是碎裂的. 对大一些的场梯度，例如 $\eta\sim 5$，体系基本上是单一的凝聚体.

在有束缚阱的存在时，文献[96]进行了仔细的分析，并讨论了在束缚气体内观察碎裂凝聚体的可能性.

10.9 在光晶格中的冷 Bose 原子

两个相对传播的激光束形成驻波，对中性原子形成了周期势. 这是因为原子感受交流 Stark 效应而趋于波腹（相当周期势的阱）. 周期势的阱形成光晶格的格点阵列，根据激光束的数目，光晶格可以是一维、二维或三维的. 在势阱中的原子往返振动，势阱间的隧穿导致能带结构. 令作用在原子上的势为

$$V_0(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{3} V_{j0}\sin^2 kx_j, \tag{10.9.1}$$

此处 k 是激光的波矢值，与波长的关系是 $k=2\pi/\lambda$. 晶格常数是 $\lambda/2$. 参数 V_0 和原子极化率与激光强度的乘积成正比. D. Jaksch 等[69]证明，装载到光晶格中的 Bose 原子的动力学实现了 M. P. A. Fisher 等[70]首先提出的 Bose-Hubbard 模型，模型的参数决定于激光束的排列和强度. 在周期势 $V_0(\boldsymbol{x})$ 和慢变化的势阱 $V_T(\boldsymbol{x})$ 中的相互作用 Bose 原子的 Hamilton 量是

$$\begin{aligned} H =& \int d^3x\psi^\dagger(\boldsymbol{x})\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V_0(\boldsymbol{x})+V_T(\boldsymbol{x})\right)\psi(\boldsymbol{x}) \\ &+\frac{1}{2}\frac{4\pi a_s\hbar^2}{m}\int d^3x\psi^\dagger(\boldsymbol{x})\psi^\dagger(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x}), \end{aligned} \tag{10.9.2}$$

此处 $\psi(\boldsymbol{x})$ 是 Bose 场算符，a_s 是 s 波散射长度. 将 $\psi(\boldsymbol{x})$ 用 Wannier 基展开，只限于每个格点处的最低振动态，有

$$\psi(\boldsymbol{x}) = \sum_i b_i w(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i), \tag{10.9.3}$$

此处 $w(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i)$ 是原子局域在格点 i 处的 Wannier 函数，b_i 是在格点 i 处的原子湮灭算符. 算符 b_i 和它的共轭算符 $b_i^\dagger$ 满足对易关系

$$[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij}. \tag{10.9.4}$$

将式(10.9.3)代入式(10.9.2)并用式(10.9.4)，式(10.9.2)就变为 Bose-Hubbard 模型的 Hamilton 量

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle} b_i^\dagger b_j + \sum_i \varepsilon_i\hat{n}_i + \frac{1}{2}U\sum_i \hat{n}_i(\hat{n}_i-1). \tag{10.9.5}$$

第一项代表原子从一个格点跳跃到一个邻近格点，求和对每一对最近邻格点进行. "跳跃常数"J 的定义是

$$J = \int d^3x w^*(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V_0(\boldsymbol{x})\right]w(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_j). \tag{10.9.6}$$

第二项是格点能，数算符 $\hat{n}_i=b_i^\dagger b_i$，$\varepsilon_i$ 由下式给出：

$$\varepsilon_i = \int d^3x V_T(\boldsymbol{x})\,|\,w(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i)\,|^2 \approx V_T(\boldsymbol{x}_i), \tag{10.9.7}$$

这是每个格点处的能量偏置. 动能算符和光学势并未包括在格点能内，因为它们只导致各格

点都相同的常数值. 第三项是相互作用能,U 由下式给出:

$$U=\frac{4\pi a_s\hbar^2}{m}\int d^3x\ |w(\boldsymbol{x})|^4. \tag{10.9.8}$$

对于给定的光学势,参数 J 和 U 可以立即算出. Wannier 函数 $w(\boldsymbol{x})=w(x)w(y)w(z)$ 可以从一维能带计算确定. 光学势与参数 J 和 U 的关系分别示于图 10.19(a)和(b). 能量的自然单位是"反冲能量"$E_R=\hbar^2k^2/2m$,这是静止的原子吸收一个激光的光量子后反冲的能量①. 用反冲能量表示原子在阱中的振动频率是 $\omega=2\sqrt{E_RV_0}/\hbar$. 最低能带和上面一个能带的能量差是 $\hbar\omega$. 谐振子波函数的大小是 $a_0=\sqrt{\hbar/m\omega}$.

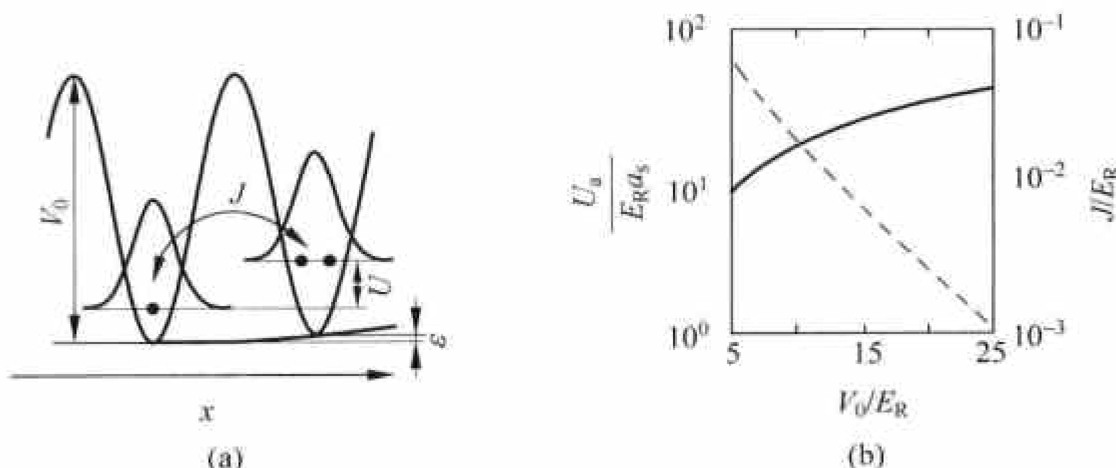


图 10.19　光学势与 J 和 U 的关系. 取自[69]

(a) 光学势; (b) U_a/E_Ra_s(实线),J/E_R(虚线)与 V_0/E_R 的关系

Bose-Hubbard 模型的物理就是 J 与 U 之间的竞争. 假定每格点平均有一个原子,在图 10.19(a)左阱中用黑点表示. 如果它跳到右阱并和原先就在右阱中的原子耦合,它们间相互作用能将系统的能量提升一个与 U 成正比的量. 跳跃本身降低一个与 J 成正比的量. 系统的基态就由 J 与 U 之间的竞争确定. 如果 V_0 足够大,使得 U 的影响大于 J 的,跳跃将变得困难. 系统的基态就决定了把所有的原子均匀分配到各个格点以使相互作用能降到最低. 令原子数为 N、格点数为 M,每格点的平均原子数为 $n=N/M$(整数). 在 U 很大的极限下,没有跳跃,n 为有限,也没有涨落. 因此也就没有格点之间的相位相干. 这种状态称为 Mott 绝缘体,由下式描述.

$$|\Psi_{MI}\rangle\propto\prod_{i=1}^{M}(b_i^\dagger)^n\ |0\rangle. \tag{10.9.9}$$

另一种情况,减小 V_0 使得跳跃更方便,各格点的粒子数涨落增加,相位相干性也增加. 出现了超流相. 在很大的 J 极限,系统的基态变为

$$|\Psi_{SF}\rangle\propto\left(\sum_{i=1}^{M}b_i^\dagger\right)^N\ |0\rangle. \tag{10.9.10}$$

这个状态是一个单一的凝聚体. Bose-Hubbard 模型预言了在增加 U/J 值时从超流体到 Mott 绝缘体的相变. 在 $n=1$ 时相变的临界值是 $U/zJ\approx5.8$,此处 z 是格点最近邻的数目[70]. 相变在模型的参数发生变化时发生. 与热涨落所诱发的热力学相变不同,它可以发生在极低的温度,被称为量子相变,是由量子涨落所诱发的.

---

① 实际上激光束与原子共振有一定的失谐,以避免原子损失。

文献[69]进行了二维平均场的数值计算.平均场基态波函数设定为

$$|\Psi_{\mathrm{MF}}\rangle=\prod_i|\varphi_i\rangle, \tag{10.9.11}$$

格点 i 的波函数用 Fock 态 $|n\rangle$ 为基展开：

$$|\varphi_i\rangle=\sum_i f_n^{(i)}|n\rangle_i. \tag{10.9.12}$$

将巨正则 Hamilton 量 $H-\mu\sum_i\hat{n}_i$ 对 $f_n^{(i)}$ 求最小化，Lagrange 不定乘子化学势 μ 保证总原子数固定：

$$\langle\Psi_{\mathrm{MF}}|H|\Psi_{\mathrm{MF}}\rangle-\mu\langle\Psi_{\mathrm{MF}}|\sum_i\hat{n}_i|\Psi_{\mathrm{MF}}\rangle\longrightarrow\min. \tag{10.9.13}$$

如果问题的解是 $|\varphi_i\rangle$，是单一的 Fock 态 $|n_i\rangle$，因而粒子数涨落是零，这就是 Mott 绝缘体的特点.如果问题的解 $|\varphi_i\rangle$ 是许多 Fock 态的叠加，而格点的平均场不为零：$\phi_i\equiv\langle b_i\rangle\neq0$，超流相就出现了.计算的结果示于图 10.20.画出了光晶格以及慢变化的阱中的冷 Bose 气体的密度 $\rho(x,y)=\langle\boldsymbol{n}(x,y)\rangle$ 以及超流成分 $|\phi(x,y)|^2$.格点 $(i,j)=\left(\frac{x}{a},\frac{y}{b}\right),i,j=0,\pm1,\cdots$.图 10.20(a)在中心部分显示 $\rho=2$ Mott 绝缘相，外面环绕有 $\rho=1$ 的绝缘相，二者中间是一个超流相的环.阱势 $V_{\mathrm{T}}(x_i)\approx\varepsilon_i$(式(10.9.7))导致了局域化学势 $\mu(x_i)=\mu-\varepsilon_i$.在绝缘相之间粒子数偏离整数 1 或 2；"小数"的部分可以自由隧穿，形成超流成分.

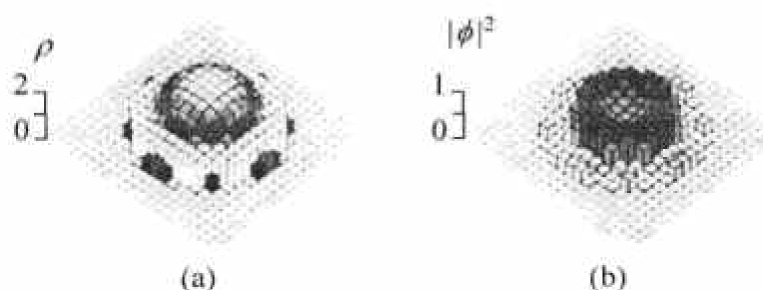


图 10.20　二维光学势和谐振子阱中的 Mott 绝缘相和超流相.取自[69]
(a) 密度；(b) 超流成分

在图 10.19(b)中我们注意到一旦 V_0 给定，J 和 U 就同时确定，不能独立变化.我们可以选择原子的不同内部结构态 $|g_1\rangle$ 和 $|g_2\rangle$，它们有不同符号的原子极化率，因此感受到的光学势相对移动 1/4 波长，如图 10.21(a)所示.这样就有二组分(a,b)的 Bose-Hubbard 模型的 Hamilton 量：

$$\begin{aligned}H=&-\Big(J\sum_{\langle i,j\rangle}a_i^\dagger b_j+H.c.\Big)+\sum_i\varepsilon_{ii}a_i^\dagger a_i+\sum_j(\varepsilon_j-\delta)b_j^\dagger b_j\\&+\frac{U_{\mathrm{aa}}}{2}\sum_i a_i^{\dagger2}a_i^2+\frac{U_{\mathrm{bb}}}{2}\sum_j b_j^{\dagger2}b_j^2+U_{\mathrm{ab}}\sum_{\langle i,j\rangle}a_i^\dagger a_i b_j^\dagger b_j,\end{aligned} \tag{10.9.14}$$

当原子不同内部态用两个 Raman 束耦合时相邻元胞间的隧穿由下列耦合所诱发：

$$J=\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^3x w_{\mathrm{a}}^*(x)\Omega_{\mathrm{eff}}(x)w_{\mathrm{b}}\left(x-\frac{\lambda}{4}\right), \tag{10.9.15}$$

此处 Ω_{eff} 是有效二光子 Rabi 频率.Raman 失谐 $-\delta$ 是为了位于 $|g_2\rangle$ 态的原子所引入的，它移动了组分 b 相对组分 a 的化学势.这用来产生棋盘式的图样：品种 a 是 Mott 绝缘态，品种 b 是超流体，如图 10.21(b)所示.

光晶格中冷 Bose 气体的超流到 Mott 绝缘相间的相变实验是由 T. Hänsch 和 I. Bloch 领导的 Munich 大学研究组进行的[71].他们用了超精细自旋态 $F=2,m_f=2$ 的 ^{87}Rb 原子.先

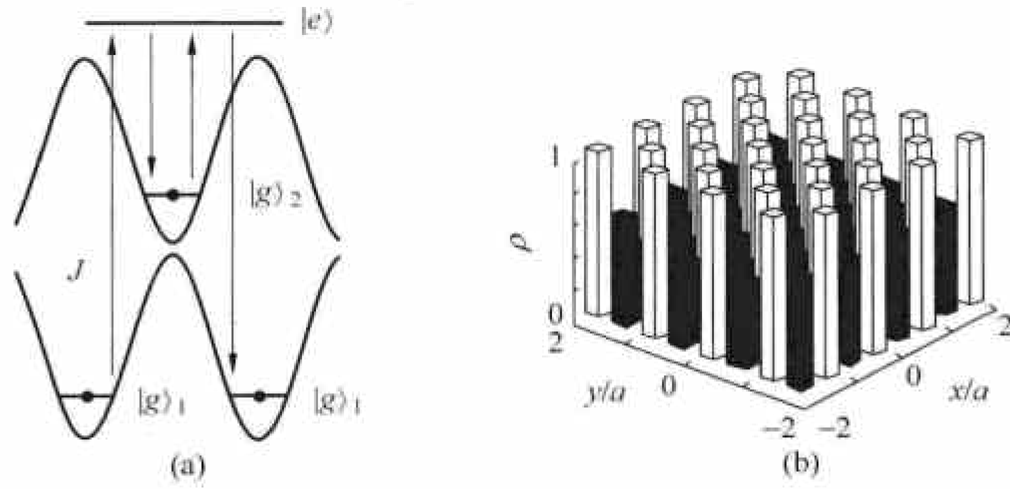


图 10.21 取自[69]

(a) 移动 $\lambda/4$ 光学势的原子能级；(b) 共存的 Mott 绝缘相和超流相，参数为：

$\mu=25J, U_{aa}=U_{bb}=45J, U_{ab}=0, \delta=-25J, \epsilon_i=0$

在磁阱中形成 Thomas-Fermi 半径 26μm 的 BEc，然后逐渐增加激光束的强度把它转移到光晶格中. 激光波长为 852nm，光学势的振幅最大可以到 $22E_R$. 光学势阱的频率是 30kHz. 激光束的 Gauss 截面产生慢变化的势 V_T，频率为 65Hz. 格点数为 1.5×10^5，BEc 共有 2×10^5 原子.

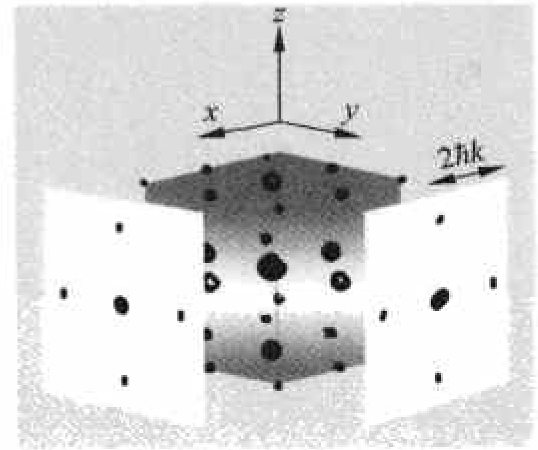


图 10.22 三维干涉图样示意[71]

在两个方向上给出造影图.

$V_0=10E_R$. 取自[71]

在达到需要的激光束强度后，所有的约束势突然取消，原子云自由膨胀，取激光造影可以验证相位的相干性. 当系统位于超流相时(浅晶格势)，所有原子是不局域化的，就得到高对比度的三维干涉图像(示于图 10.22). 当晶格势深度增加时，干涉图像变化甚大，示于图 10.23. 开始时高阶干涉极大的强度随势的深度增加而增加，这是因为越来越多的原子局域在格点处. 在 $V_0=13E_R$ 时高阶极大停止增加(图 10.23(e))，同时原子的非相干背景越来越强，直到势深度达到 $22E_R$ 时干涉图样完全消失. 值得注意的是，在演化过程中只要干涉图样还存在时，干涉的峰值都不变宽，直到它们消失在非相干背景中.

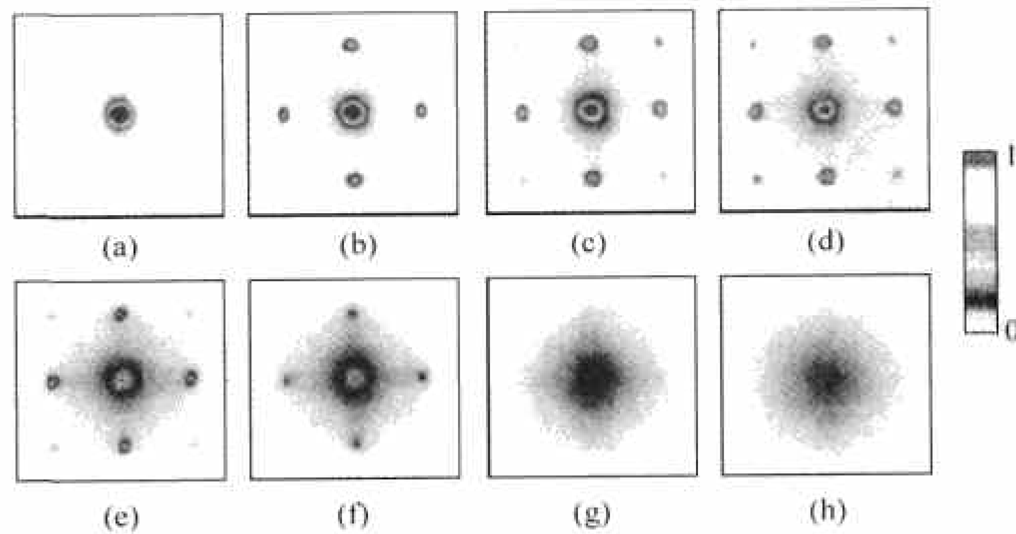


图 10.23 干涉图样造影. 取自[71]

以 E_R 为单位各图的 V_0 值依次分别是 0,3,7,10,13,14,16,20

Mott 绝缘体的一个极有趣的性质是当势深度减小到对应体系为超流体的数值时，相位相干性能够很快恢复. 在实验中，V_0 在 80ms 内升到 $22E_R$，保持 20ms. 然后把 V_0 在时间 t（取不同值）内减到 $9E_R$（图 10.24(a)）. 在图 10.24(b)中可以看出，在只用 4ms 来减小 V_0 时已经可以看到干涉图样，而在用 14ms 来减小 V_0 时，干涉峰的宽度已经和原来一样了. 与此相对照. 如果在 V_0 升高过程而体系仍在超流体状态下施加一个磁场梯度，然后达到相位非相干状态，再重复上述的 V_0 减小过程，相位相干性就不再恢复（图 10.24(b)中的圆点）. 光晶格上的 BEC 研究提供了探索 Bose 和 Fermi 强关联多体系统的可能性，在实验中参数可以精确操控. 特别是在应用 Feshbach 共振调节相互作用强度，可以提供大参数范围的精确、干净的实验结果. Zürich 高工研究组[91]（M. Köhl 等）就用 ^{40}K 两个超精细自旋态的气体填充光晶格，用 Feshbach 共振来研究不同相互作用下的能级填充，画出 Fermi 面. 不考虑相互作用时，自由 Fermi 气体先填充第一个能带（能量范围在第一 Brillouin 区），然后再填充第二能带. 但有了相互作用情况就不同了. 视相互作用强弱，会提前开始填充第二个能带. 在光晶格实验中，把磁场固定后，去掉一切俘获势，对自由膨胀的气体云进行造影，就得到动量分布. 相互作用很弱的情况下，在密度逐步增加时可以看到原子动量分布的变化，在二维动量平面上先是充满一个圆，然后圆逐渐变形趋向 Bragg 平面，最后完全充满第一 Brillouin 区的边长为 $2\hbar k$ 的正方形，此处 $k=\pi^{-1}$（晶格常数）. 原子间有相互作用时情况就不同了. 为了

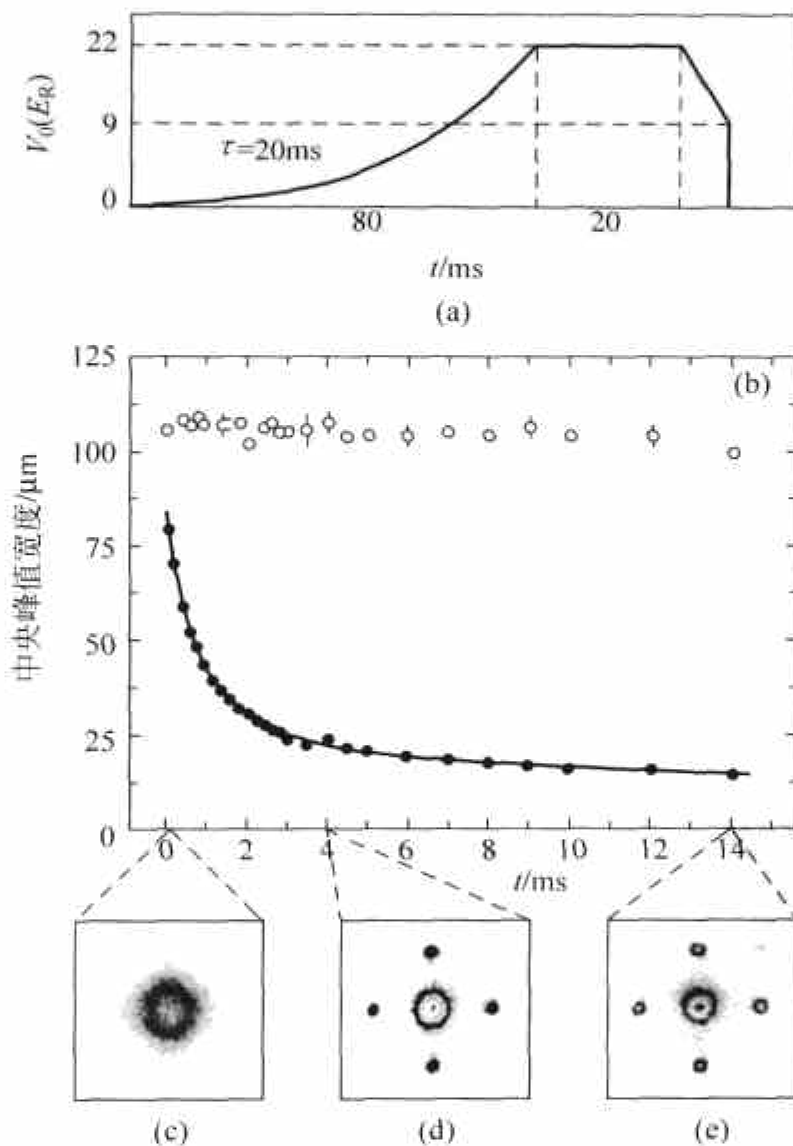


图　10.24　取自[71]

(a) V_0 变化的实验过程；(b) 不同 V_0 减小过程时间下的中央峰值宽度；(c)～(e) 三个不同 V_0 减小时间的干涉图样造影

研究相互作用的影响，将光晶格加以调整，使 $\omega_x=2\pi\times50\text{kHz}$，$\omega_y=\omega_z=2\pi\times62\text{kHz}$. 磁场扫过共振是从 $a>0$ 到 $a<0$ 方面，确定原子被转移到高能带的比例分数. 对于最终磁场在共振之上时可以观察到在晶格的弱轴方向位于高能带的原子数目有可观的增加(图 10.25).

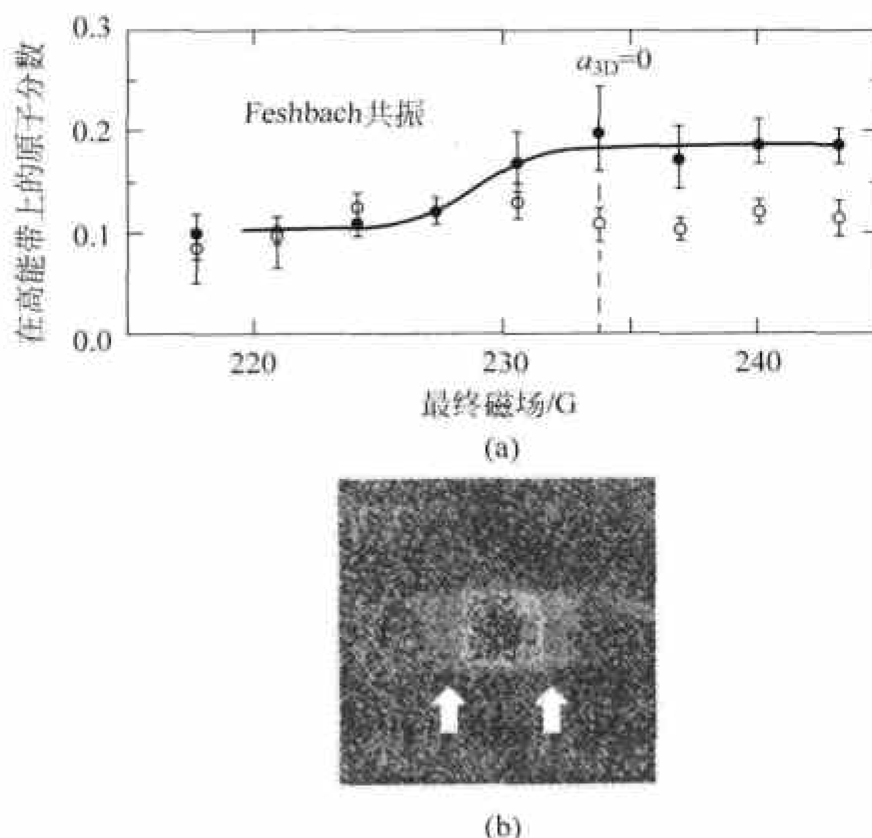


图 10.25 相互作用诱导的 Bloch 能带间的跃迁. 取自[91]
箭头标明在第一 Brillouin 区以外(相当于第二能带)的动量

这些实验结果对强相互作用下 Fermi 面变化的理论研究有参考价值.

最后我们讨论一个阵列的独立凝聚体的干涉问题. 将凝聚体装入光晶格就能做到这一点[74]. 这是我们在 10.3 节中讨论文献[27]的推广. 用交叉一个角度 θ 的激光束来形成光晶格(图 10.26(a))，这样可以把格点距离从 $\lambda/2$ 增加到 $\lambda/2(\sin\theta/2)$. 用波长 532nm 的激光束交叉 0.20rad 可以达到格点距离 2.7μm. 在实验中，先在圆柱对称磁阱中形成 ^{87}Rb 的雪茄形凝聚体，Thomas-Fermi 长度 84μm，半径 6μm. 增加光晶格势产生 30 个 BEC，每个有 10^4 原子. 由于长晶格距离和格点间的高势垒 $V_0\approx600E_R$，隧穿的 Rabi 频率仅有 10^{-4} Hz，在实验的时间尺度上可以忽略. 原子的轴向运动是被冻结的，谐振子基态长度是 120nm，远小于格点距离.

在典型实验中光晶格势在 200ms 中升到 $600E_R$. 在形成晶格前，化学势为常数. 由于 Thomas-Fermi 分布，在不同的位置原子数是不同的. 这个差别正好被相互作用能量所平衡，因此保持化学势为常数. 当光晶格势增加到 $100E_R$ 以上，格点间的隧穿就可忽略了，每格点上的原子数就固定了. 以后再增加光晶格势，格点的原子云被压缩，但相互作用能的增加不再能被粒子数的变化平衡了. 化学势就成为格点位置的函数了. 不同格点上凝聚体波函数的时间演化导致不同的相位，在足够长的时间以后各个格点的相位会有很大的差别.

将格点上的原子再保持 500ms，撤掉光阱和磁阱，原子云在自由膨胀 22ms 以后被吸收造影，记录下密度分布. 虽然不同的 BEC 相位完全没有关联，一般情况下造影还是显出干涉

图样. 图 10.26(b)、(c)显示了高达 60%的对比度.

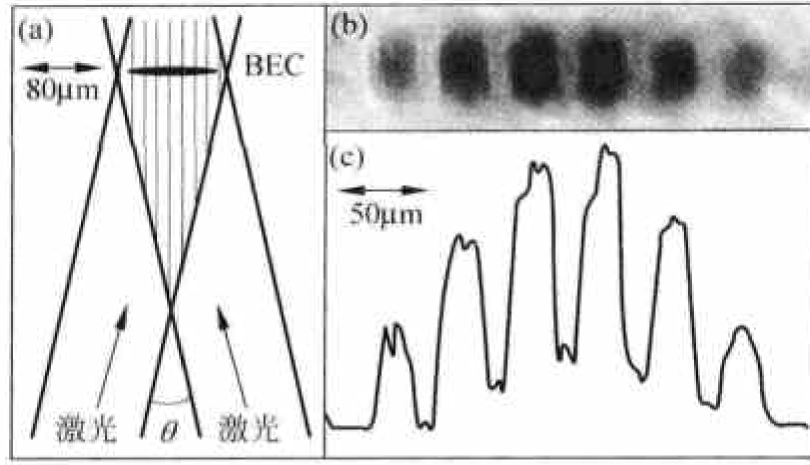


图 10.26 取自[74]

(a) 光晶格和 BEC 的形成；(b) 自由膨胀后的吸收造影；(c) 云的轴向密度分布，在径向平均了中心附近的 25μm. 拟合给出达到 60%的对比度

结果的理论分析如下. 考虑位于 $z_d=nd(n=1,\cdots,N)$的 N 个凝聚体一维阵列，每个凝聚体处于振幅为 α_n 相位为 ϕ_n 的相干态中. 在膨胀了时间 t 后在位置 z 的原子密度为

$$I(z) \propto \left| \sum \alpha_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_n} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m(z-z_n)^2/2\hbar t} \mathrm{e}^{-(z-z_n)^2/Z_0^2} \right|^2 \tag{10.9.16}$$

此处 $Z_0=\hbar t/ml$. 周期性指数函数是时间演化因子：要从格点 z_n 在时间 t 内到达 z 点，原子需要具有能量$\frac{1}{2}m\,\frac{(z-z_n)^2}{t^2}$. Gauss 因子是谐振子基态波函数膨胀了时间 t 的结果. 凝聚体在格点上的动量标度是$\hbar/l$，在时间 t 之后长度标度变为$\hbar t/ml\equiv Z_0$. 在此时的 Gauss 分布就是 $\mathrm{e}^{-(z-z_0)^2/Z_0^2}$. 假定格点上有同样的原子数 $\alpha_n=\alpha$，膨胀时间足够长，使得 $l, z_n \ll Z_0, \sqrt{\hbar t/m}$. 在此情况下，式(10.9.16)变为

$$I(z) \propto N\alpha^2 \exp(-2z^2/Z_0^2)F(z), \tag{10.9.17}$$

此处

$$F(z)=1+\sum A_n \cos(B_n+2\pi nz/D), \tag{10.9.18}$$
$$D=ht/md.$$

A_n 和 B_n 分别是 $F(z)$的第 n 泛波的振幅和相位，由 $\frac{2}{N}\sum_j \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_j-\phi_{j-n})}$ 的模和宗量给出. 到第一个泛波[①]，

$$F(z)=1+A_1\cos(B_1+2\pi z/D). \tag{10.9.19}$$

在图 10.27 中总结了 200 个相继的造影结果. 多数情况下条纹对比度 A_1 是可观的，平均为 $\langle A_1\rangle=0.34$. 图 10.27(a)显示相位 B_1 在 0 和 2π 间随机分布. 因此，如果对 200 个造影进行平均，就看不到任何调制. 为了得到相位更为相关的凝聚体，要把晶格势更快地提升(在 3ms 内)，并将凝聚体立即释放，使得退相干还来不及进行多少. 在此情况下(图 10.27(b))

---

① 考虑$\frac{1}{N}\left|\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_n}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m(z-z_n)^2/2\hbar t}\right|^2=\frac{1}{N}(\sum)^*(\sum)$. 平方各项求和得 1. 第一泛波是由 k 和 l 相差为 1 的交叉乘积求和得来. 和 ϕ 有关的部分给出$\frac{2}{N}\sum_j \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\phi_j-\phi_{j-1})}$，和 z 有关的部分给出 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}mdz/\hbar t}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi z/D}$，与 z 无关的公共相因子略去了. 最后结果为 $A_1\cos(B_1+2\pi z/D)$.

条纹相位 B_1 就不再随机分布，对 200 个造影求和还能得到有相当对比度的干涉图样. 以上的论据可以推广到二维和三维. 总结一下：相位不相关联的 BEC 阵列的一次性干涉造影是随机的，即由 A_1 决定的对比度可以在一个范围内取任意值，多数情况对比度可以是可观的值. 相位 B_1 决定沿 z 轴方向的相移. 它的随机性意味着当对许多造影取平均时会得到无结构的分布. 因此，我们应注意，不要把任何干涉图样的出现当作相位相干的确定象征.

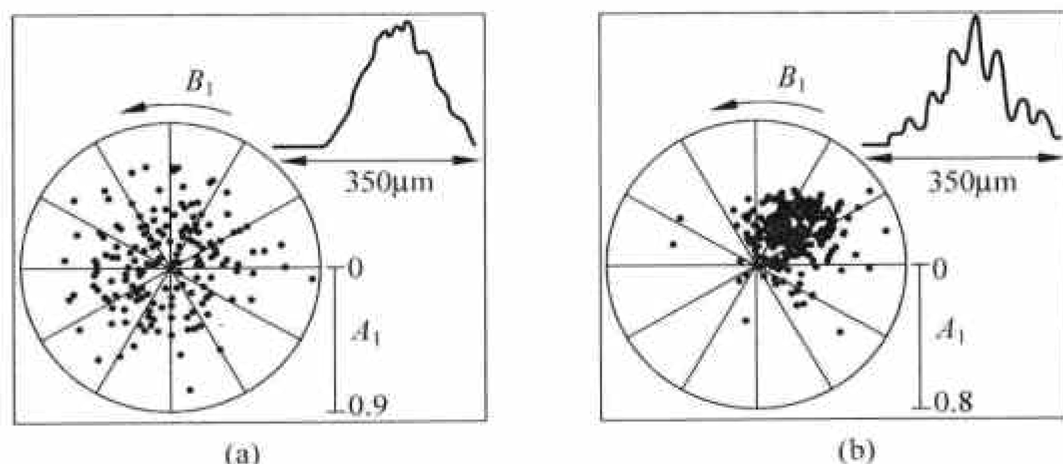


图 10.27 同样实验条件下得到的 200 个造影条纹振幅和相位(A_1, B_1)[74]. 取自[74]

(a) 相位不相干凝聚体的造影；(b) 相位相干凝聚体的造影；插图：200 个造影平均的轴向分布

10.10 Feshbach 共振和共振超流性

低能原子散射由散射长度表征，在 Feshbach 共振存在的条件下，散射长度可以通过磁场调节. 不仅相互作用的强度，而且吸引或排斥的性质也能够改变. 这个可能性开辟了冷原子气体物理实验研究的广大领域，不仅是 Bose 气体，而且包括 Fermi 气体. Fermi 原子可以形成分子，在多体相互作用存在条件下还可以形成对，就像 Cooper 对一样. 当温度足够低，分子可以形成 BEC，因为两个 Fermi 原子形成的分子是 Bose 子. Fermi 原子对在温度低于临界温度时也可以凝聚成 BEC 并显出超流性质. 这些现象的实验实现代表了 2004 年物理学的主要进展之一.

10.10.1 Feshbach 共振

在量子力学散射问题中，波矢为 $\boldsymbol{k}$ 的粒子低能散射振幅为

$$f = \frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_0} - 1). \tag{10.10.1}$$

式中 δ_0 是 s 波散射相移. 在低能散射中以 s 波散射为主. 散射理论给出

$$\tan\delta_0 = -ka. \tag{10.10.2}$$

常数 a 称为(s 波)散射长度. 在相移很小时有

$$f \approx \frac{\delta_0}{k} = -a. \tag{10.10.3}$$

散射截面为

$$\sigma = 4\pi |f|^2 = 4\pi a^2. \tag{10.10.4}$$

二粒子的低能散射仅由散射长度一个参数描述. 用二粒子的相对坐标 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$ 可以把散

射问题归结为单粒子问题，散射势就是相互作用势 $V(r)$. 图 10.28 给出原子间典型的相互作用势，R 是原子间相对距离. 通常二原子逼近进入相互作用区域，到 R 值很小时遇到很强的排斥，使原子远离，完成散射过程. 原子在相互作用区域停留时间短，数量级是相互作用区的大小除以原子相对速度. 这种情况称为势散射. 散射长度由原子的性质决定，$a>0$ 意味相互排斥作用，$a<0$ 意味相互吸引作用.

原子之间的相互作用力与价电子的自旋取向有关. 碱金属有一个价电子. Na 原子间的相互作用势在价电子自旋平行时比自旋反平行时的阱要低一些. 由于超精细相互作用(原子核自旋与价电子自旋合成为超精细自旋)使得原子在散射过程中自旋状态可以发生变化. 设价电子自旋平行的原子低能入射，在进入势阱后自旋变为反平行. 这时原子看到的是一个更高的势阱，比动能要高，原子就被囚禁了. 如果在反平行自旋的势阱中正好有一个束缚态能级在附近，(图 10.28 中表明有一个能量差为 ε 的能级存在)，原子就暂时能够以束缚态存在于自旋反平行势阱中. 对能量很低的一对原子而言，自旋平行的道是开道，自旋反平行的道是闭道. 直到超精细相互作用使这对原子的自旋再变成平行时，较低的势阱对它们就变得畅通无阻了. 它们就分离，完成散射过程，见图 10.29. $\varepsilon=0$，即在闭道中正好有一个能级和开道的散射态能量相同，被称为共振，ε 很小时，发生的散射称为共振散射. 和势散射不同，原子在势阱中要度过一段时间，等待自旋再次变更取向.

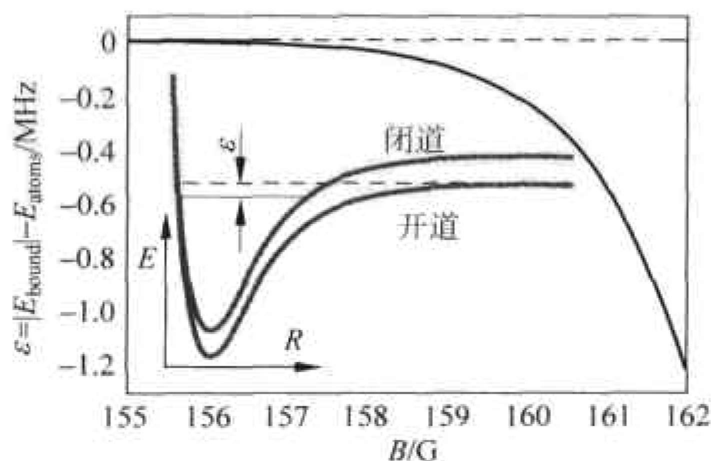


图 10.28　原子间的相互作用势，势与自旋有关，对低能散射态可以分出开道与闭道

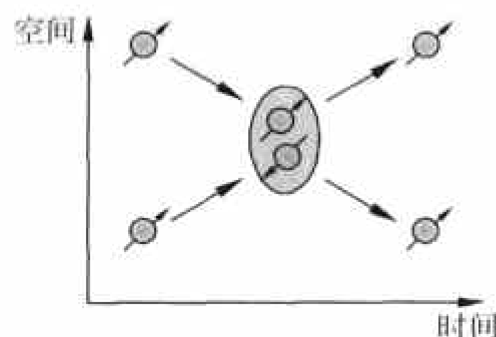


图 10.29　自旋取向改变导致共振散射示意图

通常共振散射比势散射时间要大几个量级. 共振散射的散射截面显示共振峰，其宽度比势散射截面曲线的宽度要小得多. 这是由量子力学能量和时间的不确定关系所决定的. 共振散射为主时，散射长度也随之发生变化：

$$a = a_0 - \frac{\Gamma}{2k\varepsilon}, \tag{10.10.5}$$

式中 a_0 是远离共振时的散射长度，Γ 是共振峰宽度. 从式(10.10.5)可知，共振时 $a\to\pm\infty$. 极为重要的一点是：闭道的束缚态位置，即参数 ε，是可以用磁场调节的. 令束缚态的磁矩为 μ_0，单个原子的磁矩为 μ_i，则散射态的磁矩为 $2\mu_i$，在磁场中散射态和束缚态的 Zeeman 能量差为 $(2\mu_i-\mu_0)B$. 因此有

$$\varepsilon(B) = (2\mu_i - \mu_0)(B - B_0), \tag{10.10.6}$$

此处 B_0 为发生共振时的磁场. 因此调节磁场可以使 ϵ 变更符号，即在共振附近式(10.10.5)的第二项可以是很大的正数或负数. 图 10.30 给出^{40}K 原子散射长度随磁场的变化. 由于美国核物理学家 Hermann Feshbach 在 20 世纪 40 年代对热中子在重原子核上的共振散射作了系统的研究，当今冷原子研究中的共振散射就称为 Feshbach 共振. 在共振时，$a\to\pm\infty$，这是否意味着原子相互作用会是无限强，是否会有无限大的散射截面？这都是不会发生的. 式(10.10.3)和式(10.10.4)是在 δ_0 很小时的近似结果. 式(10.10.1)散射振幅和相移的关系有：

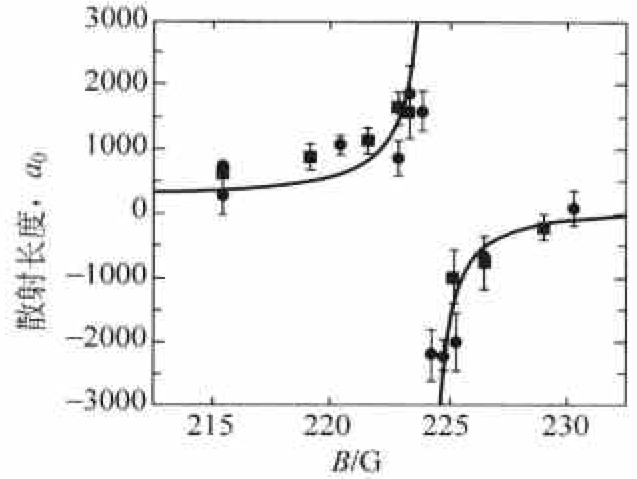


图 10.30 ^{40}K 的散射长度. 实验点是通过相互作用能测量换算的. 取自[75]

$$f=\frac{1}{2ik}(-2\sin^2\delta_0+2i\sin\delta_0\cos\delta_0)=-\frac{1}{2ik}\left(\frac{2k^2a^2+2ika}{1+k^2a^2}\right)$$

$$=-a\frac{1-ika}{1+k^2a^2}. \tag{10.10.7}$$

f 的实部决定基态的能移，虚部决定散射时间的倒数. 当 ka 很大时，$f\to i/k$，$\sigma\to 4\pi/k^2$. 这个截面值与散射长度无关，称为截面的幺正极限. 由于散射过程的幺正性(反映几率守恒)，截面不可能超越这个极限值. 不论何种原子，到共振散射时截面都相同，而与原子的散射长度无关. 这被称为“普适行为”(universal behavior). 至于在共振条件下的原子相互作用能量，何天伦与 E. Mueller[76] 给出

$$|\epsilon_{\mathrm{int}}|=\frac{3k_BTn}{2}\left(\frac{n\lambda^3}{2^{3/2}}\right), \tag{10.10.8}$$

此处 k_B 为 Boltzmann 常数，T 为气体温度，n 为密度，λ 为热 de Broglie 波长：

$$\lambda=\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)^{1/2}. \tag{10.10.9}$$

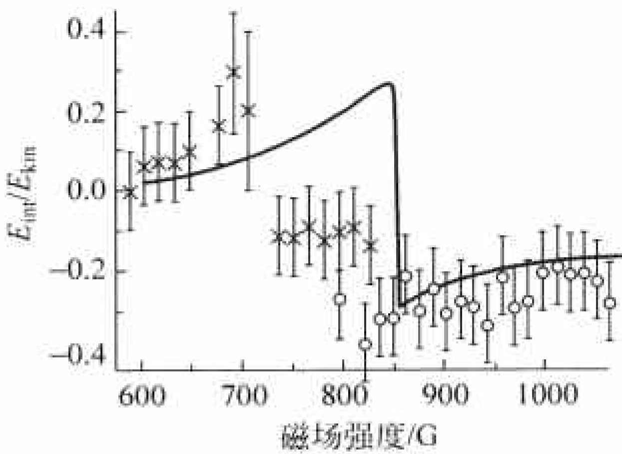


图 10.31 相互作用能在共振区内与散射长度无关. 取自[77]

共振时的相互作用能量也与散射长度无关，呈现普适行为. 图 10.31 的实验点是 C. Regal 和 D. Jin[75] 用射频谱学方法测得的^{40}K 气体的散射长度 a. 可见远离共振时相互作用能量由散射长度决定，而接近共振时相互作用能显示普适行为而与散射长度无关. 法国高等师范的 C. Salomon 研究组[77] 直接测量相互作用能与动能之比作为磁场强度的函数，示于图 10.31. 在共振区域完全呈现出普适行为. 何天伦与 E. Mueller 理论和实验结果符合很好.

10.10.2 简并 Fermi 气体

要制备简并 Fermi 气体，首先要冷却它. 例如用蒸发冷却法使能量最大的原子逃逸. 余下的气体原子通过碰撞而趋向平衡. 但在磁阱中约束的 Fermi 气体原子，它们价电子的自旋是同向的. 原子间的相对轨道角动量必须为奇数，至少是 $l=1$ 的 p 态. 这样两个原子的波

函数才能是反对称的，满足费米统计要求. 在低能碰撞中，p 态的分波散射幅比 s 态要小得多，因此碰撞几率很低. 通过 Feshbach 共振可以使相互作用增强很多，促进趋向平衡的过程.

在 Feshbach 共振两侧 Fermi 气体具有极为丰富的物理性质. 先考虑两个 Fermi 原子的 Feshbach 共振. 当磁场 B 从大到小趋于共振值 B_0 时，开道散射态和闭道束缚态的能量也趋于相等. 此时即将出现一对原子组成的束缚态. B 继续减小，束缚态的结合能增加，空间尺度减小. 在共振之上 $B>B_0$ 原子处于非束缚状态.

多体 Fermi 原子的情况有所不同. BCS-BEC 跨接理论（BCS-BEC crossover theory）[78,79] 给出以下图像(图 10.32). 在从 $B<B_0$ 一方趋近 Feshbach 共振时，束缚态的尺度增大. 接近共振时束缚态的尺度与原子平均距离相等. 所有 Fermi 原子气体，只要密度相同，在 Feshbach 共振处的性质都一样，呈现普适性. 在共振之上闭道和开道状态间的涨落继续将费米原子约束成对. 余下的气体原子通过碰撞而趋于平衡，这样原子对和自由原子同时并存. 在 $a<0$(即 $B>B_0$)一侧远离共振处，较弱的相互作用将一对 Fermi 原子配成 BCS 对. 两个 Fermi 原子配对所成的体系是 Bose 粒子，因此在温度足够低时，大量的对也能形成 Bose-Einstein 凝聚体，表现出超流体性质. BCS 超流转变温度对相互作用强度的依赖很灵敏. 弱耦合理论给出：

$$T_C \sim T_F e^{-\frac{\pi}{2|a|k_F}}, \tag{10.10.10}$$

此处 k_F 是 Fermi 动量，$T_F=\varepsilon_F/k_B$ 是 Fermi 温度，其和简并温度近乎相等. 在相互作用弱时，转变温度很低. BCS 对在空间有很松散的结构. 配对的两个原子之间的距离比气体原子间的平均距离要大得多，即在它们之间还有许多其他的原子存在. 减小磁场，逐步趋近共振时，转变温度很快增加. 但此时导致式(10.10.10)的弱耦合理论已不再适用. 接近共振时，配对原子的距离已经和气体原子平均距离相等. 在 $a>0$(即 $B<B_0$)一侧束缚态的能量低于散射态，束缚态的结合能和尺度大小相应地随磁场的减小而增加和减小. 远离共振时束缚态的尺度和原子大小相同. 当温度低于临界温度时，束缚态形成 Bose-Einstein 凝聚体. 在温度升高到大于临界温度时，超流性质被热涨落破坏，即 BEC 不复存在，但原子配对仍然存在，而对之间的相干已经丧失，称为准能隙(pseudogap).

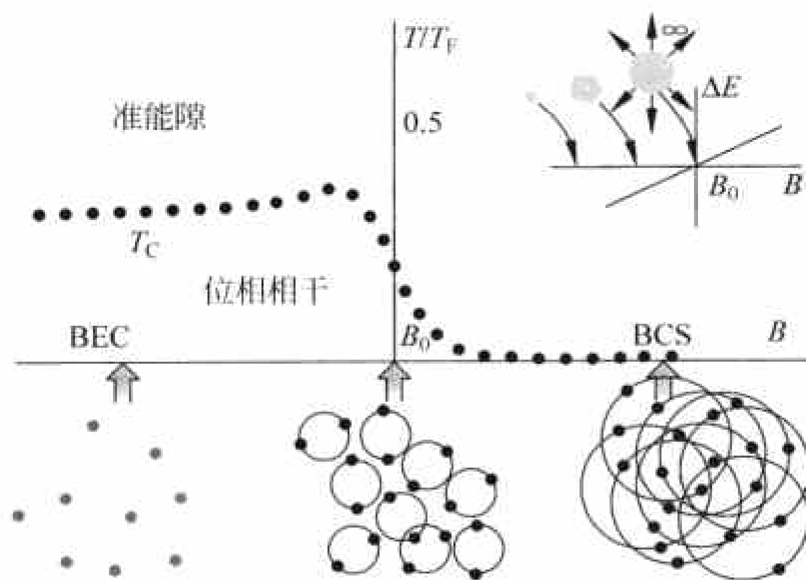


图 10.32　Fermi 气体 BEC-BCS 跨接相图. 取自[79]

图 10.32 给出超冷 Fermi 气体的 BEC-BCS 跨越的示意相图. 插图代表两个 Fermi 子的情况，主图代表多体 Fermi 子的情况. 主图中 T_C 是 BEC(或超流)转变温度. 图下方绘出原子对的尺度. 主图左方体系是分子状态，在 T_C 之下是 BEC，在 T_C 之上有一段准能隙. 在灰色线以上形成对已经困难了. 插图中 ΔE 代表束缚态与开道散射态之间的能量差. 在实验验证方面，先实现的是分子态的 BEC. 由于分子具有不同的内部状态，有关它的研究可以揭示丰富的物理性质. 在 $a<0$(即 $B>B_0$)一侧，接近共振附近，Fermi 原子对的凝聚体(称为对凝聚体，pair condensate)具有和远处的 BCS 型配对的凝聚体不同的性质. 关于它的发现从 2004 年初到现在已经有了不同实验组的报道. 以下对分子凝聚体和对凝聚体的实验研究分别作介绍.

10.10.3 Fermi 原子组成分子以及分子的 BEC

Fermi 原子组成的分子 BEC 之发现被认为是冷量子气体研究的一个里程碑，它也被作为向对凝聚超流体研究进军的桥头堡.

要得到分子 BEC，先要得到长寿命的分子. 在 2003 年 JILA 的 D. Jin 研究组[80]将 ^{40}K 气体的 50%以上转变为分子 $^{49}K_2$. 采用两种内部状态为 $|f=9/2, m_f=-5/2\rangle$ 和 $|f=9/2, m_f=-9/2\rangle$ 原子的等量混合(此处 f 和 m_f 分别是超精细自旋及其分量)，在 $T=150nK$ 从 Feshbach 共振的 $a<0$ 一侧减小磁场到 $a>0$ 一侧. 分子产生的探测方法使用射频分子离解谱，可以得到分子的波函数和结合能，与理论结果完全一致. 实验结果示于图 10.33. 在磁场不同条件下用 Stern-Gerlach 方法分开不同自旋态，再作激光吸收造影. 图 10.33(a)是在磁场扫掠前，显示 $m_f=-5/2, -9/2$ 两种成分. 在将磁场绝热调到 $a>0$ 区后(图 10.33(b))，可看到两种成分损失过半.(分子是造影激光看不到的.)用射频离解得到两个原子位于 $m_f=-7/2, -9/2$ 态. 图 10.33(c)显示 $m_f=-7/2$ 成分和较强的 $m_f=-9/2$ 成分. 一部分 $m_f=-9/2$ 成分是图(b)原有的，另一部分是分子离解所释出的. 重要的一点是，分子和原子在磁场调节过程中的相互转变是可逆的.

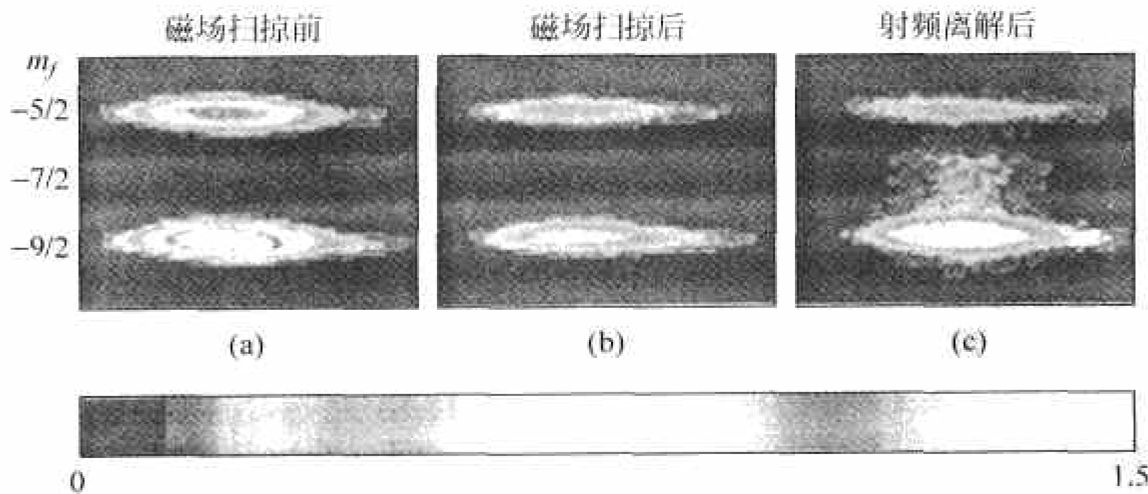


图 10.33 磁场扫掠前. 取自[80]

(a) 扫掠后；(b) 以及射频离解后；(c) 不同自旋状态的吸收造影

此处 Innsbruck 的 R. Grimm 研究组，法国高等师范的 C. Salomon 研究组，美国 Rice University 的 R. Hulet 研究组都得到了费米原子组成的分子. 这些分子的一个特点是寿命较长，可达秒的量级. 玻色原子形成的分子寿命则较短，只有若干毫秒量级. 原因是费米原子

形成的分子中两个价电子自旋是反平行的，其离解的主要机制是三体碰撞.不论第三个原子的价电子自旋如何，总会和分子中两个价电子之一的自旋相同.根据Pauli不相容原理，自旋相同的两个电子相对轨道角动量不能为零.因此s波散射是不可能的，碰撞率受到了很大压制.这被称为Pauli阻塞(Pauli blocking).玻色原子形成的分子则不受此限制，三体碰撞离解率较高.寿命长的分子对形成玻色爱因斯坦凝聚体是很有利的.

分子BEC是在2003年冬季得到的.Innsbruck的R.Grimm研究组，JILA的D.Jin研究组和MIT的W.Ketterle研究组的成果受到普遍关注.原因是一方面可以用分子BEC作为基础，经过绝热改变磁场达到Feshbach共振的$a<0$一侧，试图获得费米原子对的凝聚体(超流体)，另一方面是形成BEC的分子具有可以调节的丰富内部结构.三个研究组的方案各有特点.下面介绍的是D.Jin研究组直接用造影观测的实验[81].采用^{40}K气体的两个不同超精细结构态$|f=9/2,m_f=-7/2\rangle$和$|f=9/2,m_f=-9/2\rangle$的混合，它们的Feshbach共振位于$B_0=202.10$G.在10ms时间内缓慢地将磁场从278G调到201.54G.然后将束缚光阱撤去，令气体自由膨胀20ms后再用激光沿轴方向对分子作飞行时间吸收造影，得到分子的空间分布.由于气体是自由膨胀，空间分布直接反映动量分布.图10.34表明，如果从$T=1.54T_C$开始调低磁场图10.34(a)，动量分布显示不出BEC的存在.图10.34(c)给出动量分布的剖面.图10.34(b)和(d)是从$T=0.49T_C$开始，动量分布明显显示BEC形成，剖面显示在Gauss分布的本底上叠加BEC的动量峰.实验表明最多有88%的原子可以转变为分子.

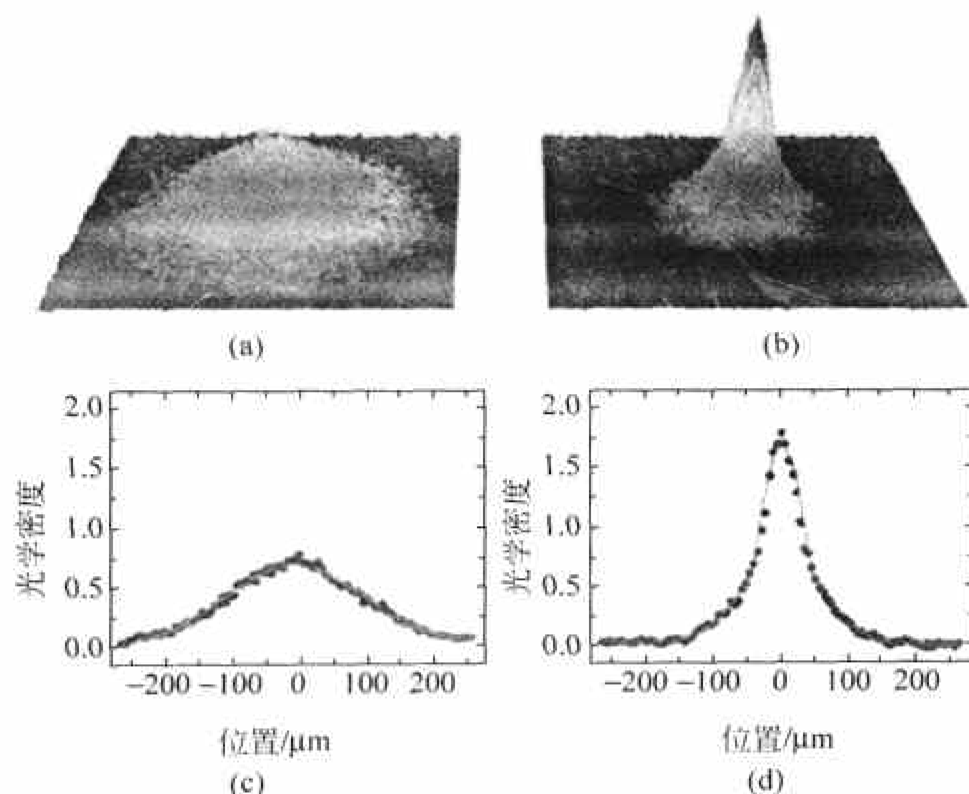


图10.34 分子云的飞行时间造影在BEC临界温度以上((a)和(c))和以下((b)和(d))的光学密度.取自[81]

10.10.4 Fermi原子对的凝聚体

获得Fermi原子对超流体在2004年初就有了报道.取得结果的仍是Jin[82]，Grimm[83]和Ketterle[84]研究组.由于Fermi原子对在Feshbach共振$a<0$区形成原子对依靠集体效应，不能在撤阱和气体膨胀后观测，Grimm组用的是"光学现场造影"(Optical in-situ

imaging)，这样只能观测到气体的空间分布，它并不能转换为动量分布. 关于凝聚体的存在只能靠和理论比较间接推断. Jin 研究组创造了一种"对投影技术"，将 Fermi 原子对转变为分子. 测量分子的动量分布就能推断原子对的动量分布. 现将他们的结果简述如下. ^{40}K 气体的两个最低超精细结构态 $|f=9/2,m_f=-7/2\rangle$ 和 $|f=9/2,m_f=-9/2\rangle$ 在 202.1G 发生 Feshbach 共振，共振宽度为 7.8G. 研究组在共振两侧都观测到 Fermi 原子凝聚，相当于 BCS-BEC 跨越. 先将磁场固定在 $a<0$ 接近共振处. 将磁场扫掠到 $a>0$. 这个"投影磁场"扫掠的速度必须快慢得当：要慢得使分子可以形成，又要快得不致使粒子在阱中碰撞并跑得太远. 投影可以使 60%到 80%原子组成分子. 变更初始温度，发现有一个 T/T_F 与磁场失谐 $B-B_0$ 值关系的阈值曲线，在曲线之下能观察到动量在 0 附近的分子. 作者将此诠释为反映费米原子对凝聚体的存在. 在 $a<0$ 一侧二体 Feshbach 共振不能支持分子状态，因此凝聚体只能是由多体效应给出的费米原子对. 实验结果示于图 10.35. 初始温度是 $T/T_F=0.08$，$T_F=0.35\mu$K. 磁场随时间变化示于插图内. 开始是在 $a<0$ 区. 降到虚线处是 Feshbach 共振. 在共振上下(上下箭头)停留不同时间. 主图黑点为停留 2ms，三角为停留 30ms. 然后将光阱撤掉，将磁场扫掠约 10G 到 $a>0$ 区以便原子对变为分子. 图 10.35 给出在不同初始磁场值时最终得到的凝聚粒子数. 不同停留时间的结果显示对凝聚体在共振附近以及在 BCS 一侧的寿命比再 BEC 一侧的长得多. 气体云自由膨胀后进行造影，得到图 10.36. 三个图分别对应在 BCS 一侧的 $\Delta B=0.12,0.25,0.55$G. 起始温度 $T/T_F=0.07$. 分析结果得到 N_0/N 值为 0.10,0.05,0.01. 显示在 BCS 一侧接近共振处 Fermi 原子对较多，远离共振处原子相互作用太弱，以致临界温度太低，观测到的对数量极少.

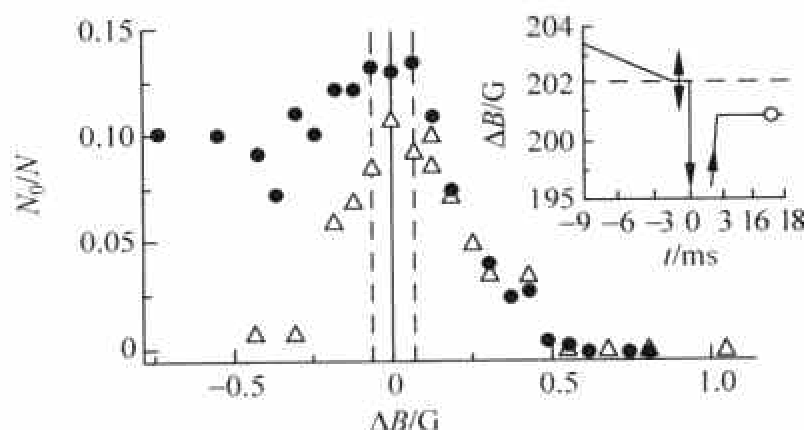


图 10.35 凝聚粒子数比例 N_0/N 作为磁场失谐值的函数. 取自[81]

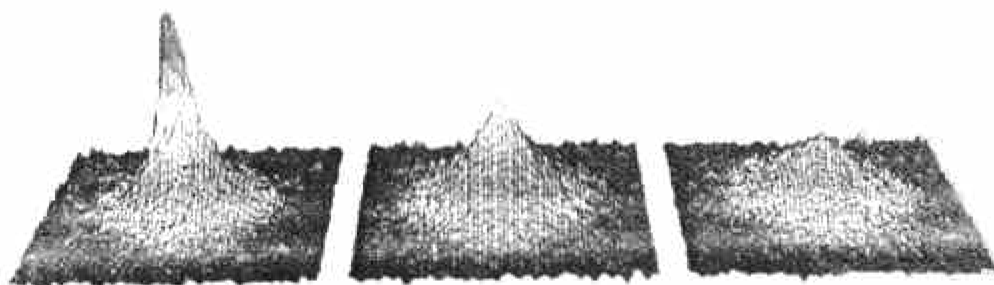


图 10.36 气体云飞行时间造影. 取自[81]

MIT 的 W. Ketterle 研究组[84]也用了投影技术，采用^{6}Li，得到的凝聚体比例高达 80%. 由于在 BCS 一侧的 Fermi 原子对结构比较松散(见图 10.32 下方示意图)，在磁场通过共振向 BEC 一测扫掠时究竟是哪一对原子结合成分子？如果就近选择，会有不少对的总动量不

为零，即多数对不能凝聚. 如果测出 80% 动量为零的凝聚体，只能判断在 BCS 一侧也有束缚态的分子存在. 作者的解释是，虽然束缚态在 $\Delta B>0$（即在 BCS 一侧）比散射态能量高，以二体作用判断是不会稳定的. 但因在 BCS 一侧有自由费米原子分布在较低的动量状态上，因此分子离解在动量空间上受到抑制. 只有在能量差较大时才能离解. 这些亚稳态的分子在磁场向 BEC 一测扫掠时就以稳定分子出现. 一时间人们对实验研究能否确立对超流体的存在的问题存在怀疑.

Innsbruck 的 R. Grimm 研究组[85]采用了不同的实验途径：用射频谱学方法测定费米原子对的能隙. 用^{6}Li 的三个超精细结构态 $|1\rangle$，$|2\rangle$ 和 $|3\rangle$（基本上相当于核自旋的 $m_I=1,0,-1$）. 取含有 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 两种状态等量混合的气体. 如果 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 之间没有配对，射频辐射场的频率等于 $|2\rangle\to|3\rangle$ 跃迁频率时被共振吸收. 如果存在配对，就会出现另一个吸收频率，相当于将配对 $|1\rangle$，$|2\rangle$ 离解. 实验表明，在温度降低到一定值时果然出现了这个新的频率. 对 $|1\rangle$，$|2\rangle$ 两种态的原子，$B=720$G 在 BEC 区，相当于 $a=120$nm. $B=822$G，837G 相当于共振的下限和上限，$B=875$G 在 BCS 区，相当于 $a=-600$nm. 图 10.37 给出不同温度下在共振两侧的射频谱. 由于在磁场扫掠时温度会有变化，须确定气体在 BEC 极限下的温度 T'. 磁场扫掠到 BCS 区时温度会更低. 图中第一行是在温度 $T'=6T_F$，($T_F=15\mu$K) 下取的. 看出在磁场不同时都只有相当 $|2\rangle\to|3\rangle$ 跃迁的吸收频率. 将此频率定为横坐标原点. 中间一行相当 $T'=0.5T_F$，($T_F=3.4\mu$K). 在 BEC 区看到了相当分子结合能的峰，在共振区以及 BCS 一侧都有另一个吸收峰，可以认为是 Fermi 原子对的能隙. 最下一行相当 $T'<0.2T_F$，($T_F=1.2\mu$K). 自由原子 $|1\rangle$，$|2\rangle$ 态都不存在了，只有相当分子和 Fermi 原子对的结合能和能隙的吸收峰. 注意在 BEC 区横坐标尺度与其他磁场值时不同：分子结合能比原子对的能隙要大得多. 由于芬兰 Torma 研究组的工作支持，射频谱线型实验工作与已知理论结果符合得很好.

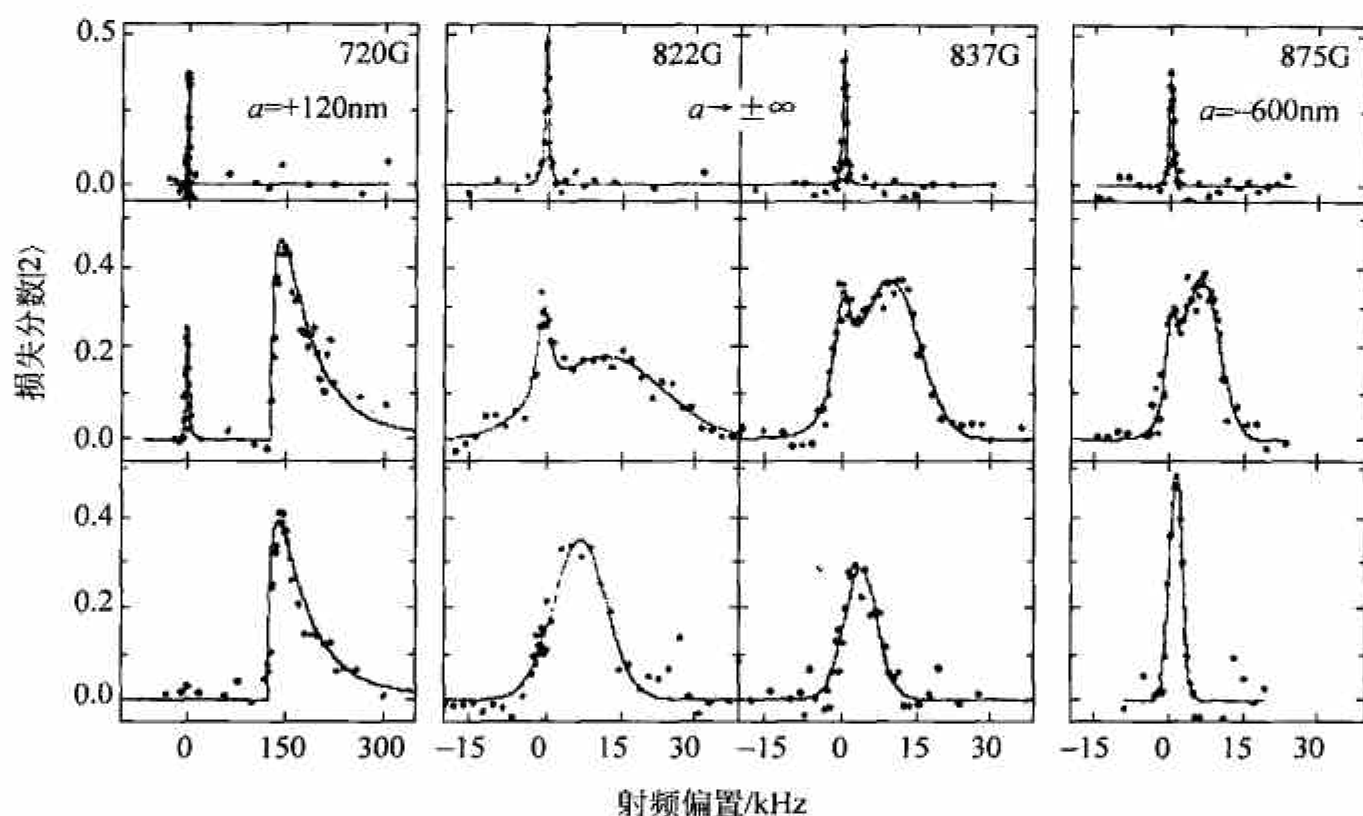


图 10.37 不同磁场下不同温度的射频谱. 取自[85]

到此，已有更多物理学家相信 Fermi 原子对超流体存在. 何天伦的评述[79]便是这种观点的总结. 他还在文献[87]和文献[88]中从理论上对文献[82]和文献[84]两项研究给予强

有力的支持.他认为这就是在强相互作用区 Fermi 原子对存在的标志.他们采用了三种势：V_{I} 为方势阱，V_{II} 为有高垒的方势阱，V_{III} 为 δ 函数势.因为 V_{II} 可以容许长寿命的准束缚态，它具有二通道共振模型的特点.

为了描述凝聚体分子的占总粒子数的分数，定义动量为 $\boldsymbol{q}$ 的 Fermi 子对的产生算符：

$$D_q^{\dagger}(x) = \sum_{k,\alpha\beta} f_{k,\alpha\beta}(x) a_{k+q/2,\alpha}^{\dagger} a_{-k+q/2,\beta}^{\dagger} \tag{10.10.11}$$

此处 $x=(k_{\text{F}}a_s)^{-1}$ 是离共振的距离，是表征在跨越中系统的状态的变量，$f_{k,\alpha\beta}(x)$ 是对波函数的 Fourier 变换：

$$f_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}\,;\,x) = \Omega^{-1/2} \sum_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} f_{k,\alpha\beta}(x) \tag{10.10.12}$$

Ω 是系统的体积.具有 N 个零动量对的凝聚体状态由下式描述

$$| x\rangle = \mathcal{N} D_{q=0}^{\dagger N}(x) \,|\, \text{vac}\rangle \tag{10.10.13}$$

成对基态是

$$| \Psi(x)\rangle = \mathcal{N} \prod_{k,\alpha\beta} (u_k(x) + v_{k,\alpha\beta}(x) a_{k,\alpha}^{\dagger} a_{-k,\beta}^{\dagger}) \,|\, \text{vac}\rangle \tag{10.10.14}$$

此处 u 和 v 与 $f_{k,\alpha\beta}(x)$ 的关系是

$$f_{k,\alpha\beta}(x) = \zeta v_{k,\alpha\beta}(x)/u_k, \tag{10.10.15}$$

ζ 是归一化常数.在对投影过程中体系从 x_0 演化到 x.此时凝聚和非凝聚分子的数目分别是

$$N_0 = \langle D_0^{\dagger}(x) D_0(x)\rangle_{x_0} \text{ 和 } N_{\text{ex}} = \sum_{q\neq 0} \langle D_q^{\dagger}(x) D_q(x)\rangle_{x0}$$

这两个数字分别计算如下.我们有

$$N_0 = | \langle D_0(x)\rangle |^2 = \left| \sum f_{k,\alpha\beta}(x) \Psi_{k,\alpha\beta}^{*}(x_0)/2 \right|^2, \tag{10.10.16}$$

此处 $\Psi_{k,\alpha\beta}^{*}(x_0) = \langle a_{k,\alpha}^{\dagger} a_{-k,\beta}^{\dagger}\rangle$ 是凝聚体的序参量.此外还有

$$N_{\text{ex}} = \sum_{k,q} | f_{k,\alpha\beta} |^2 n_{q,\alpha} n_{q-2k}/2 \tag{10.10.17}$$

此处 $n_k = \langle a_{k\alpha}^{\dagger} a_{k\alpha}\rangle_{x_0}$.式(10.10.16)表明，$N_0$ 是初始序参量 $\Psi_{\alpha\beta}$ 和末态波函数的重叠.因此凝聚体占总数的分数是

$$\frac{N_0}{N_m} = \frac{\left| \sum_k f_k(x) \Psi_k^{*} \right|^2}{\left| \sum_k f_k(x) \Psi_k^{*} \right|^2 + \sum_{k,q} | f_k |^2 n_q n_{q-2k}} \tag{10.10.18}$$

此处分子总数 N_{m} 是 $N_{\text{m}} = N_0 + N_{\text{ex}}$.

跨越图景由以下 Hamilton 量表征：

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k a_{k,\sigma}^{\dagger} a_{k,\sigma} + \sum_{k,k',q} V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') a_{q/2+k,\uparrow}^{\dagger} a_{q/2-k,\downarrow}^{\dagger} a_{q/2-k',\downarrow} a_{q/2+k',\uparrow} \tag{10.10.19}$$

这里 V 就采用三种前面给出过的势.和 BCS 理论一样将有关的参数 u 和 v 写出

$$| u_k |^2 = (E_k + \xi_k)/2E_k, \quad | v_k |^2 = (E_k - \xi_k)/2E_k$$

此处

$$\xi_k = e_k - \mu, E_k = \sqrt{\xi^2 + \Delta_k^2},$$

我们就得到能隙方程

$$\Delta_k = -\sum_{k'} V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \Delta_{k'}/(2E_{k'}), \tag{10.10.20}$$

序参量 $\Psi_k = u_k v_k = \Delta_k/2E_k$，以及布居数 $n_k = v_k^2$.化学势 μ 由以下关系决定

$$n = \Omega^{-1}\sum_k n_k = n(T=0,\mu). \tag{10.10.21}$$

用不同的势对能隙方程数值求解，从式(10.10.23)解出 μ，就得到有关量 $\Delta_k, u_k, v_k, \Psi_k$ 和 n_k 作为势参量和粒子数的函数. 所有三种势在共振附近都给出同样的性质(例如化学势、能隙、相干因子等)，这表明了在此体制下普适性(与相互作用细节无关)的存在. 文献[87]给出的 $\Psi(\boldsymbol{k})$ 图示于图 10.38，虚线、实验和点线分别代表 $x=2$(BEC 区)，$x=0$(共振)和 $x=-2$(BCS 区). 在 BCS 区看到在 k_F 处的峰值，显示原子配对的强烈信号. 在 BEC 区则看到分子的波函数，没有极值的表现，而在共振处则是介于二者之间.

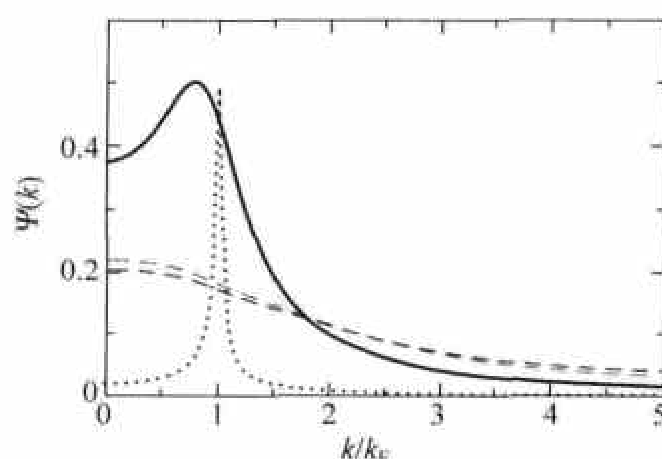


图 10.38　跨过共振不同区域的序参量. 取自[87]

以上讨论的各个实验研究都指向 Fermi 子气体的超流性，而且和理论工作的预言有很好的符合，但还都不算是直接的证明. 旋转气体中涡旋的存在是超流性的直接证明，因为它是描述超流性的宏观波函数的直接后果. Ketterle 研究组[89]在强相互作用体制下直接观察了涡旋点阵. 他们采用了 50%：50% ^{6}Li 的两个最低超精细自旋态，在这两个态之间有一个宽 Feshbach 共振，相应磁场为 834G. BEC-BCS 跨越区由 $1/k_F|a|<1$ 定义，位于 780G 和 925G 之间. 在 812G 对 Li 原子云用两束平行于轴的激光"搅拌"300～500ms，然后在不同实验序列中把磁场调低到 792G(在 BEC 一侧)，833G(共振)和 853G(在 BCS 一侧). 等待 500ms 平衡时间后去掉俘获势令气体自由膨胀 2ms，快速将磁场调到 735G，在此磁场值下再经过 9ms 膨胀后造影. 这个措施之所以必要，是因为 Fermi 原子对在气体膨胀中是很不稳定的，而在 735G 磁场条件下对已经变成稳定的分子，这样可以保留已经存在的涡旋点阵. 那么，如何能排除涡旋点阵不是在 735G 条件下形成的呢? 这个可能能够排除，因为磁场调整所需的时间远小于涡旋形成的时间(经实验确定为几百 ms). 在共振及两侧形成的涡旋点阵示于图 10.39. 研究组还研究了涡旋点阵的寿命与磁场(相互作用强度)的关系，结果示于图 10.40.

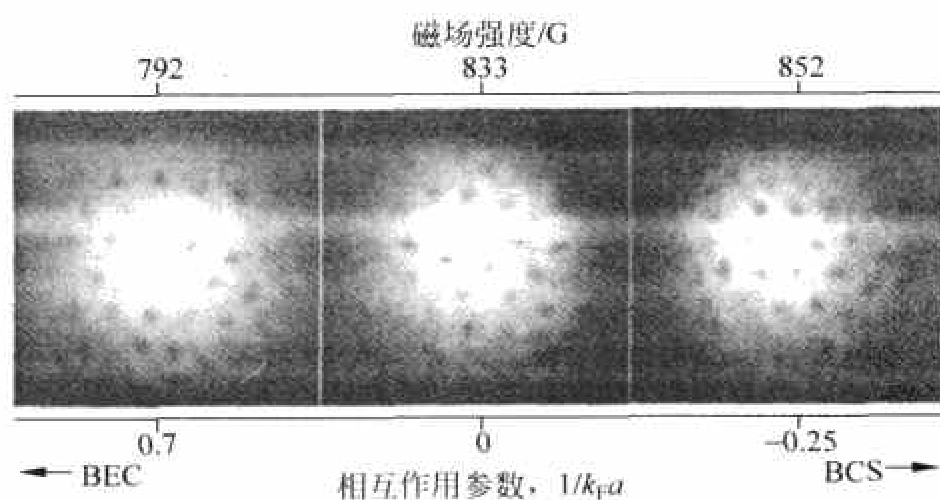


图 10.39　在 BEC-BCS 跨越区的涡旋点阵. 取自[89]

R. Grimm[90]称这项研究为"超流性的最后的、戏剧性的证明". Fermi 气体超流性可以很好地模拟一般量子物质的物理，从高温超导、中子星和夸克—胶子等离子体. 用 T_C/T_F 来作比较，普通超导体的 T_C/T_F 是 10^{-4}，超流 ^{3}He 的是 10^{-3}，高温超导体的是 10^{-2}，而 ^{6}Li 超

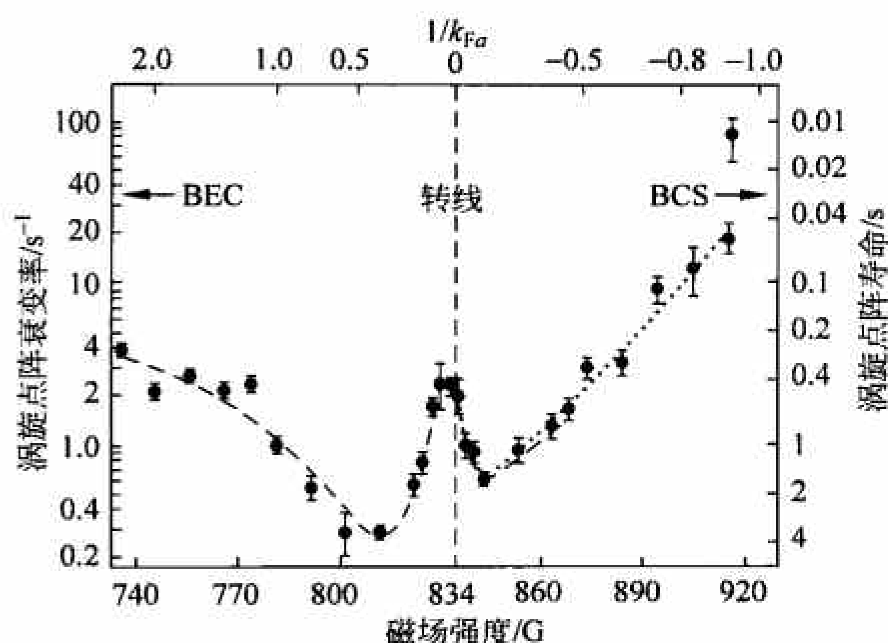


图 10.40　涡旋点阵衰变率和寿命与磁场强度和相互作用强度的关系. 取自[89]
虚线和点线分别是 Gauss 和指数函数拟合. 垂直点划线标明 Feshbach 共振.

流体的是 0.3. 因此^{6}Li 是迄今为止所知的最高温的超流体. 由于其纯净度和高度精确的操控可能性，超冷量子气体研究可望对于多体量子物理各领域有参照的价值.

由于超冷量子气体的研究持续兴旺，已经有了若干评述性文章[61-63]及暑期学校文集[64,65]，并已有专著出版[66].

参考文献

[1] Kleppner D. Physics Today, 1996, 49(8): 11.

[2] Anderson M H, Ensher J R, Mathews M R, Wieman C E, Cornell E A. Science, 1995, 269: 198.

[3] Davies K B, Mewes M-O, Anderson M R, van Druten N J, Durfee D S, Kurn D M, Ketterle W. Phys Rev Lett, 1995, 75: 3969.

[4] Bradley C C, Sackett C A, Toulett J J, Hulet R G. Phys Rev Lett, 1995, 75: 1687.

[5] Kittel C, Kroemer H. Thermal Physics, 2nd edition. San Fransisco: W. H. Freeman, 1980.

[6] Huang K. Statistical Mechanics, 2nd edition. New York: John Wiley, 1987.

[7] Huang K. In: Studies in Statistical Mechanics, vol. II. J. de Boer, G. E. Uhlenbeck, eds. Amsterdam: North Holland, 1964.

[8] Huang K. In: Bose-Einstein Condensation. A. Griffin, D. W. Snoke, S. Stringari, eds. New York: Cambridge University Press, 1995.

[9] Penrose O. Philos Mag, 1951, 42: 1373.

[10] Penrose O, Onsager L. Phys Rev, 1956, 104: 576.

[11] Yang C N. Rev Mod Phys, 1962, 34: 4.

[12] Lifshitz E M, Pitaevskii L P. Statistical Physics, Part 2. Oxford: Pergamon, 1980.

[13] Sewell G L. J Statistical Physics, 61: 415, 1990; J Math Phys, 1997, 38: 2053.

[14] Nieh H T, Su G, Zhao B H. Phys Rev, 1996, B 51: 3760.

[15] Su G, Suzuki M. Phys Rev Lett, 2001, 86: 2708.

[16] Leggett A, Sols F. Found Phys, 1993, 21: 353.

[17] Leggett A. In: Bose-Einstein Condensation. A. Griffin, D. W. Snoke, S. Stringari, eds. New York: Cambridge University Press, 1995.

[18] Leggett A. Rev Mod Phys,2001,73: 307.
[19] Anderson P W. Rev Mod Phys,1966,38: 298.
[20] Nieto M. Physica Scripta,1993,T48: 5.
[21] Anderson P W. Basic Notions of Condensed Matter Physics. Menlo Park: Benjamin-Cummings,1984.
[22] Andrews M R, Townsend C G, Miesner H-J. Durfee D S, Kurn D M, Ketterle W. Science, 1997, 275: 637.
[23] Liu W M, Wu B, Niu Q. Phys Rev Lett,2000,84: 2294.
[24] Kozuma M, Deng L, Hagley E W, Wen J, Litwak R, Helmerson K, Rolston S L, Phillips W D. Phys Rev Lett,1999,82: 871; Torii Y, Suzuki Y, Kozuma M, Kuga T, Deng L, Hagley E W. Cond-mat/9908160,1999.
[25] Denschlag J, Simsarian J E, Feder D L, Clark C W, Collins L A, Cubizolles J, Deng L, Hagley E W, Helmerson K, Reinhardt W P, Rolston S L, Schneider B I, Phillips W D. Science,2000,297: 97.
[26] Anderson P W. In: The Lessons of Quantum Theory. J. de Boer, E. Dal, O. Ulfbeck, eds. Amsterdam: North-Holland,1986.
[27] Castin Y, Dalibard J. Phys Rev,1997,A 55: 4330.
[28] Javanainen J, Yoo S M. Phys Rev Lett,1996,76: 161.
[29] Nozieres P, Pines D. The Theory of Quantum Liquids, Vol. II. Redwood City: Addison-Wesley,1990.
[30] Hugenholtz N M, Pines D. Phys Rev,1959,116: 489.
[31] Lee T D, Yang C N. Phys Rev,1957,105: 767.
[32] Lee T D, Huang K, Yang C N. Phys Rev,1957,106: 1135.
[33] Bagnato V, Pritchard D E, Kleppner D. Phys Rev,1987,A 35: 4354.
[34] Bagnato V, Kleppner D. Phys Rev,1991,A 44: 7439.
[35] Landau L D, Lifshitz E M. Quantum Mechanics, 3rd edition. Oxford: Pergamon,1977.
[36] Oliva J. Phys Rev,1989,B 39: 4197.
[37] Chou T T, Yang C N, Yu L H. Phys Rev,1996,A53: 4257.
[38] Chou T T, Yang C N, Yu L H. Phys Rev,1997,A 55: 1179.
[39] Ginzburg V L, Pitaevskii L P. Sov Phys —JETP,1958,7: 858.
[40] Gross E P. Nuovo Cimento,1961,20: 454.
[41] Pitaevskii L P. Sov. Phys. —JETP,1961,13: 451.
[42] Lewenstein M, You L. Phys Rev Lett,1996,77: 3489.
[43] Blaizot J P, Ripka G. Quantum Theory of Finite Systems. Cambridge, MA: MIT Press,1986.
[44] Edwards M, Burnett K. Phys Rev,1995,A 51: 1382.
[45] Ruprecht P A, Holland M J, Burnett K, Edwards M. Phys Rev,1995,A 51: 4704.
[46] Baym G, Pethick C J. Phys Rev Lett,1996,76: 6.
[47] Kagan Y, Surkov E L, Shlyapnikov G V. Phys Rev, 1996,A 54: R1753; Phys Rev,1997,A 55: R18.
[48] Dalfovo F, Stringari S. Phys Rev,1996,A 53: 2477.
[49] Williams J E, Holland M J. Nature,1999,401: 568.
[50] Mattews M R, Anderson B P, Haljan P C, Hall D S, Wieman C E, Cornell E A. Phys Rev Lett,1999, 83: 2498.
[51] Madison K W, Chevy F, Wohlleben W, Dalibard J. Phys Rev Lett,2000,84: 806.
[52] Ado-Shaeer J R, Raman C, Vogels J M, Ketterle W. Science,2001,292: 476.
[53] Raman C, Köhl M, Onofrio R, Durfee D S, Kuklewicz C E, Hadzibabic Z, Ketterle W. Phys Rev Lett, 1999,83: 2502.
[54] Stoof H T C. Phys Rev Lett,1997,78: 768.
[55] Gardiner C W, Zoller P. Phys Rev,1997,A 55: 2902; 1998,58: 536.

[56] Kagan Y, Svistunov B V. Phys Rev Lett, 1997, 79: 3331.

[57] Gardiner C W, Lee M D, Ballagh R J, Davies M J, Zoller P. Phys Rev Lett, 1998, 81: 5266.

[58] Stamper-Kurn D M, Andrews M R, Chikkatur A P, Inouye S, Miesner H-J, Stenger J, Ketterle W. Phys Rev Lett, 1998, 80: 2027.

[59] Ho T-L. Phys Rev Lett, 1998, 81: 742.

[60] Ho T-L, Shenoy V B. Phys Rev Lett, 1996, 77: 2596; 1996, 77: 3276.

[61] Stringari S. Phys Rev Lett, 1996, 77: 2360.

[62] Parkins A S, Walls D F. Phys Reports, 1998, 303: 1.

[63] Dalfovo F, Giorgini S, Pitaevskii L P, Stringari S. Rev Mod Phys, 1999, 71: 463; A. Leggett: Rev Mod Phys, 2001, 73: 307.

[64] Inguscio M, Stringari S, Wieman C E. Bose-Einstein Condensation in Atomic Gases, International School of Physics"Enrico Fermi", course 140. Amsterdam: IOP Press, 1999.

[65] Savage C M, Das M P. Bose-Einstein Condensation. Singapore: World Scientific, 2000.

[66] Pethick C J, Smith H. Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases. New York: Cambridge University Press, 2001; Pitaevskii L, Stringari S. Bose-Einstein Condensation. Oxford University Press, 2003.

[67] Lieb E H, Yngvason J. Phys Rev Lett, 1998, 80: 2504.

[68] Lieb E H, Seiringer R, Yngvason J. Phys Rev, 2000, A 61: 043602.

[69] Jaksch D, Bruder C, Cirac J I, Gardiner C W, Zoller P. Phys Rev Lett, 1998, 81: 3108.

[70] Fisher M P A, Weichman P B, Grinstein G, Fisher D S. Phys Rev, 1989, B 40: 546.

[71] Greiner M, Mandel O, Esslinger T, Hänsch T W, Bloch I. Nature, 2002, 415: 39.

[72] Cornell E A, Wieman C E. Rev Mod Phys, 2002, 74: 875; Ketterle W. Rev Mod Phys, 2002 74: 1131.

[73] Hadzibabic Z, Stock S, Battelier B, Bretin V, Dalibard J. Phys Rev Lett, 2004, 93: 180403.

[74] Regal C, Jin D. Phys Rev Lett, 2003, 90: 230404.

[75] Ho T L, Mueller E. Phys Rev Lett, 2004, 92: 160404.

[76] Bourdel T, et al. Cond-mat/0303079.

[77] Nozieres P, Schmidt-Rink S, Low J. Temp Phys, 1985, 59: 195.

[78] Ho T L. Science, 2004, 305: 1114.

[79] Regal C, et al. Nature, 2003, 424: 47.

[80] Greiner M, et al. Nature, 2003, 426: 537.

[81] Regal C, et al. Phys Rev Lett, 2004, 92: 040403.

[82] Bartenstein M, et al. Phys Rev Lett, 2004, 92: 120401.

[83] Zwierlein M, et al. Phys Rev Lett, 2004, 92: 120403.

[84] Chin C, et al. Science, 2004, 305: 1128.

[85] Randeria M, et al. Phys Rev, 1990, B 41: 327.

[86] Diener R, Ho T L, cond-mat/0404517.

[87] Diener R, Ho T L. cond-mat/0405174.

[88] Zwierlein M, et al. Nature, 2005, 435: 1047.

[89] Grimm R. Nature, 2005, 435: 1047.

[90] Köhl M, et al. Phys Rev Lett, 2005, 94: 080403.

[91] Duine R A, Stoot H T C. Phys Reports, 2004, 396: 115.

[92] Saba M, et al. Science, 2005, 307: 1945.

[93] Pitaevski L, Stringari S. Phys Rev Lett, 1999, 83: 4237.

[94] Javanainen J. Science, 2005, 307: 1883.

[95] Ho T-L, Yip S K. Phys Rev Lett, 2000, 8-4: 4031

[96] Lawck, Pu H, Bigelow N P. Phys Rev Lett, 1998, 81: 5257

第11章
量子力学中的Yangian对易关系

从本章开始，将着重介绍杨振宁-Baxter系统(简称杨-Baxter系统)①. 它是处理一大类非线性量子可积模型的普遍理论，对象是多体系统. 30年来这方面的研究取得了长足进展，成为数学物理研究中的一个蓬勃发展的分支. 由于许多数学家参与，很多文献在形式上比较数学化. 然而不少理论物理问题又与它密切相关，甚至量子力学中很基础的氢原子也是如此. 在第3章中我们介绍了氢原子的$SO(4)$对称性：动力学对称性本身能够给出束缚态能谱. 在本章中将看到氢原子还具有Yangian对称性，即它具有超出李代数范围的一种无穷维代数结构，这是对氢原子更深一步的理解. 在此基础上，在第11章将介绍杨-Baxter系统最基本的内容，然后再回到氢原子问题，这将有助于对杨-Baxter系统的了解. 第12章将从一些物理问题介绍量子代数的本质.

11.1 氢原子的张量算符与Yangian

在本书4.3节中讨论了氢原子的$SO(4)$动力学对称性. 对称群的生成元是角动量算符$I_\alpha(\alpha=1,2,3)$以及标度化了的Runge-Lenz矢量算符B_α. $\boldsymbol{I}$与$\boldsymbol{B}$是满足以下$SO(4)$对易关系的一种特殊实现：

$$[I_\alpha, I_\beta] = \mathrm{i}\epsilon_{\alpha\beta\gamma} I_\gamma, \tag{11.1.1}$$

$$[B_\alpha, B_\beta] = \mathrm{i}\epsilon_{\alpha\beta\gamma} I_\gamma, \tag{11.1.2}$$

$$[I_\alpha, B_\beta] = \mathrm{i}\epsilon_{\alpha\beta\gamma} B_\gamma. \tag{11.1.3}$$

其中$\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$为三维全反对称张量，即$\epsilon_{123}=1$，且任意两个下标交换时改变符号，例如$\epsilon_{213}=-1$等. 在式(11.1.1)～式(11.1.3)中如令$I_\alpha=L_\alpha$，$B_\alpha=M'_\alpha$，则回到第4.3节的情况($\hbar=1$). 现在我们先从式(11.1.1)～式(11.1.3)所示的一般情况出发建立较为一般的理论，然后再回到氢原子问题.

定义张量算符

$$\boldsymbol{J} = \frac{1}{2\mathrm{i}} \boldsymbol{I} \times \boldsymbol{B}, \tag{11.1.4}$$

---

① 有关杨-Baxter方程早期文章已汇编在文献[1]中，从物理角度综合介绍相关的内容可参阅文献[2].

算符 I_α 与 J_β 的对易子是简单的：

$$\begin{aligned}[][I_\alpha, J_\beta] &= \varepsilon_{\beta\mu\nu}\left[I_\alpha, \frac{1}{2\mathrm{i}}I_\mu B_\nu\right] \\ &= \varepsilon_{\beta\mu\nu}\left([I_\alpha, I_\mu]\frac{1}{2\mathrm{i}}B_\nu + I_\mu\left[I_\alpha, \frac{1}{2\mathrm{i}}B_\nu\right]\right) \\ &= \frac{1}{2}\varepsilon_{\beta\mu\nu}(\varepsilon_{\alpha\mu\lambda}I_\lambda B_\nu + \varepsilon_{\alpha\nu\lambda}I_\mu B_\lambda) \\ &= I_\alpha B_\beta - I_\beta B_\alpha \\ &= \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\gamma. \end{aligned} \tag{11.1.5}$$

在以上推导中用了 $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ 的性质：

$$\varepsilon_{\alpha\beta\mu}\varepsilon_{\gamma\delta\mu} = \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} - \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}. \tag{11.1.6}$$

对易关系式(11.1.5)和式(11.1.3)是相似的，但 J_α, J_β 的对易子却比较复杂：

$$\begin{aligned}[][J_\alpha, J_\beta] &= -\frac{1}{4}\varepsilon_{\alpha\mu\nu}\varepsilon_{\beta\sigma\tau}[I_\mu B_\nu, I_\sigma B_\tau] \\ &= -\frac{1}{4}\varepsilon_{\alpha\mu\nu}\varepsilon_{\beta\sigma\tau}([I_\mu, I_\sigma]B_\nu B_\tau + I_\sigma[I_\mu, B_\tau]B_\nu \\ &\quad + I_\mu[B_\nu, I_\sigma]B_\tau + I_\mu I_\sigma[B_\nu, B_\tau]). \end{aligned} \tag{11.1.7}$$

利用式(11.1.1)～式(11.1.3)以及式(11.1.6)，并用到 $\varepsilon_{\alpha\beta\mu}\varepsilon_{\alpha\beta\nu} = 2\delta_{\mu\nu}$，得到

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\alpha\mu\nu}I_\mu I_\nu &= \frac{1}{2}\varepsilon_{\alpha\mu\nu}[I_\mu, I_\nu] = \frac{1}{2}\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\mu\nu}\varepsilon_{\mu\nu\lambda}I_\lambda \\ &= \mathrm{i}\delta_{\alpha\lambda}I_\lambda = \mathrm{i}I_\lambda, \end{aligned} \tag{11.1.8}$$

(11.1.7)式简化为

$$[J_\alpha, J_\beta] = -\frac{\mathrm{i}}{4}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}I_\gamma[\boldsymbol{I}^2 - \boldsymbol{B}^2 - 1]. \tag{11.1.9}$$

对氢原子，从式(4.3.20)和式(4.3.26)（置$\hbar=1$ 以及 $m=1$）有 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{M}'$，于是有

$$\boldsymbol{B}^2 = -(\boldsymbol{I}^2 + 1) - \frac{k^2}{2E}. \tag{11.1.10}$$

将式(11.1.10)代入式(11.1.9)，得

$$[J_\alpha, J_\beta] = -\frac{1}{4}\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}I_\gamma\left(2\boldsymbol{I}^2 + \frac{k^2}{2E}\right). \tag{11.1.11}$$

上式中对易子涉及能量本征值，且其右端不能表示为 I_α 与 J_β 线性组合的形式（现为非线性组合）. 为此，我们要计算式(11.1.11)与 J_α 的对易关系. 为了方便，矢量算符分量采用 $(+,-,3)$形式代替 $\alpha=1,2,3$，例如

$$I_+ = I_1 + \mathrm{i}I_2, \quad I_- = I_1 - \mathrm{i}I_2.$$

式(11.1.4)的分量形式为

$$\left.\begin{aligned} J_\pm &= \mp\frac{1}{2}(L_\pm B_3 - L_3 B_\pm), \\ J_3 &= \frac{1}{4}(L_+ B_- - L_- B_+). \end{aligned}\right\} \tag{11.1.12}$$

$\boldsymbol{I}$ 分量的对易关系是

$$[I_3, I_\pm] = \pm I_\pm, \quad [I_+, I_-] = 2I_3. \tag{11.1.13}$$

$\boldsymbol{I}, \boldsymbol{J}$ 间对易关系(11.1.5)式的新形式是

$$\left.\begin{aligned}&[I_\pm,J_\pm]=0,\quad [I_3,J_3]=0,\\&[I_3,J_\pm]=[J_3,I_\pm]=\pm J_\pm,\\&[I_+,J_-]=[J_+,I_-]=2J_3.\end{aligned}\right\}\tag{11.1.14}$$

此外还有

$$\left.\begin{aligned}&[I^2,J_\pm]=\pm 2(I_3J_\pm-J_3I_\pm),\\&[I^2,J_3]=I_+J_--J_+I_-.\end{aligned}\right\}\tag{11.1.15}$$

式(11.1.9)给出

$$\left.\begin{aligned}&[J_3,J_\pm]=\mp\frac{1}{4}\left(2\boldsymbol{I}^2+\frac{k^2}{2E}\right)I_\pm,\\&[J_+,J_-]=-\frac{1}{2}\left(2\boldsymbol{I}^2+\frac{k^2}{2E}\right)I_3.\end{aligned}\right\}\tag{11.1.16}$$

用式(11.1.16)和式(11.1.15)可以得出高阶对易关系:

$$\begin{aligned}[J_\pm,[J_3,J_\pm]]&=\mp\frac{1}{4}\left[J_\pm,\left(2\boldsymbol{I}^2+\frac{k^2}{2E}\right)I_\pm\right]\\&=\mp\frac{1}{2}[J_\pm,\boldsymbol{I}^2]I_\pm\\&=(I_3J_\pm-J_3I_\pm)I_\pm.\end{aligned}$$

利用式(11.1.14)可以得到它的其他分量形式:

$$\begin{aligned}[J_\pm,[J_3,J_\pm]]&=(I_3J_\pm-J_3I_\pm)I_\pm\\&=(J_\pm I_3-I_\pm J_3)I_\pm\\&=I_\pm(I_3J_\pm-J_3I_\pm)\\&=I_\pm(J_\pm I_3-I_\pm J_3).\end{aligned}\tag{11.1.17}$$

类似地可以得到

$$\begin{aligned}[J_3,[J_+,J_-]]&=I_3(I_+J_--J_+I_-)\\&=I_3(J_-I_+-I_-J_+)\\&=(I_+J_--J_+I_-)I_3\\&=(J_-I_+-I_-J_+)I_3.\end{aligned}\tag{11.1.18}$$

进一步可以计算$[J_\pm,[J_+,J_-]]$以及$[J_3,[J_3,J_\pm]]$. 为此,引入

$$K=[J_3,J_\pm],$$

则 Jacobi 恒等式为

$$[I_\mp,[J_\pm,K]]+[J_\pm,[K,I_\mp]]+[K,[I_\mp,J_\pm]]=0.\tag{11.1.19}$$

上式第三项用式(11.1.14),可改写为

$$\begin{aligned}[K,\mp 2J_3]&=\mp 2[[J_3,J_\pm],J_3]\\&=\mp 2[J_3,[J_\pm,J_3]],\end{aligned}$$

而第二项中

$$\begin{aligned}[K,I_\mp]&=[J_3J_\pm,I_\mp]-[J_\pm J_3,I_\mp]\\&=[J_\pm,I_\mp]J_\pm-J_\pm[J_3,J_\pm]=\pm[J_\pm,J_\pm],\end{aligned}$$

故(11.1.19)式第二项即为

$$\pm[J_\pm,[J_\pm,J_\mp]]=[J_\pm,[J_+,J_-]],$$

而第一项用式(11.1.15)可写作

$$\begin{aligned}&[I_\mp, I_\pm(J_\pm I_3 - I_\pm J_3)]\\&=[I_\mp, I_\pm](J_\pm I_3 - I_\pm J_3) + I_\pm[I_\mp, (J_\pm I_3 - I_\pm J_3)]\\&=-2I_3(J_\pm I_3 - I_\pm J_3) + I_\pm(J_\pm I_\mp - I_\pm J_\mp).\end{aligned}$$

将结果代回恒等式(11.1.19),得

$$\begin{aligned}&[J_\pm,[J_+,J_-]]\pm 2[J_3,[J_3,J_\pm]]\\&=2I_3(J_\pm I_3 - I_\pm J_3) + I_\pm(I_\pm J_\mp - J_\pm I_\mp),\end{aligned} \tag{11.1.20}$$

因此,考虑到式(11.1.14)与 Jacobi 恒等式可知,式(11.1.17),式(11.1.18)与式(11.1.20)中只有一个是独立的.

以上的推证表明,角动量算符 $\boldsymbol{I}$ 与张量算符 $\boldsymbol{J}=\frac{1}{2\mathrm{i}}\boldsymbol{I}\times\boldsymbol{B}$ 作为一个集合,满足式(11.1.13),式(11.1.14),式(11.1.17),式(11.1.18)及其推论(式(11.1.20)). $\boldsymbol{I}$ 所满足的(11.1.13)式是李代数关系. $\boldsymbol{I},\boldsymbol{J}$ 分量间的对易关系(式(11.1.14))反映了 $\boldsymbol{J}$ 的矢量性质,而 $\boldsymbol{J}$ 分量间的对易关系(式(11.1.17)~(11.1.20))则比较复杂. 这些代数关系有深刻的含义,将在以下逐步阐明.

上面讨论的算符集合 $\boldsymbol{I},\boldsymbol{J}$ 均源于李代数 $SL(2)$,且满足对易关系(式(11.1.13),式(11.1.14),式(11.1.17)~式(11.1.20)). 由$(\boldsymbol{I},\boldsymbol{J})$(注意 $\boldsymbol{I}$ 不限于角动量 $\boldsymbol{L},\boldsymbol{J}$,也不限于 $\frac{1}{2\mathrm{i}}\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{B}$)组成的集合称为 $Y(SL(2))$. 这一类代数结构称为 Yangian,是数学家 V. G. Drinfeld 于 1985 年命名的[3],以表征杨振宁教授在研究多体可积模型(1967 年)中的杰出贡献. Yangian 的引入始于一维量子多体问题严格解的研究,此后成为数学物理的一个热门方向. 在不少问题中,它是和抽象的概念联系在一起的. 但从以上的例子说明,它已包含在氢原子问题之中.

11.2 Yangian 代数

将上一节的代数关系进行推广:

(1)
$$[I_\lambda, I_\mu]=C_{\lambda\mu\nu}I_\nu,\quad \lambda,\mu,\nu=1,2,3,\cdots, \tag{11.2.1}$$

式中 $C_{\lambda\mu\nu}$ 为结构常数,当 $C_{\lambda\mu\nu}=\mathrm{i}\varepsilon_{\lambda\mu\nu},\lambda,\mu,\nu=1,2,3$ 时式(11.2.1)还原为式(11.1.13).

(2)
$$[I_\lambda, J_\mu]=C_{\lambda\mu\nu}J_\nu,\quad \lambda,\mu,\nu=1,2,3,\cdots, \tag{11.2.2}$$

当 $C_{\lambda\mu\nu}=\mathrm{i}\varepsilon_{\lambda\mu\nu},\lambda,\mu,\nu=1,2,3$ 时式(11.2.2)还原为式(11.1.14).

(3)
$$[J_\lambda,[J_\mu,I_\nu]]-[I_\lambda,[J_\mu,J_\nu]]=a_{\lambda\mu\nu\alpha\beta\gamma}\{I_\alpha,I_\beta,I_\gamma\}, \tag{11.2.3}$$

其中

$$a_{\lambda\mu\nu\alpha\beta\gamma}=\frac{1}{4!}C_{\lambda\alpha\sigma}C_{\mu\beta\tau}C_{\nu\gamma\rho}C_{\sigma\tau\rho}, \tag{11.2.4}$$

$$\{x_1,x_2,x_3\}=\sum_{\substack{i,j,k=1,2,3\\ i\neq j\neq k}}x_ix_jx_k. \tag{11.2.5}$$

(11.2.5)式是三个量的对称组合.

(4)
$$\begin{aligned}&[[J_\lambda,J_\mu],[I_\sigma,J_\tau]]+[[J_\sigma,J_\tau],[I_\lambda,J_\mu]]\\&=(a_{\lambda\mu\nu\alpha\beta\gamma}C_{\sigma\tau\nu}+a_{\sigma\tau\nu\alpha\beta\gamma}C_{\lambda\mu\nu})\{I_\alpha,I_\beta,J_\gamma\}.\end{aligned} \tag{11.2.6}$$

当 $C_{\lambda\mu\nu}=\mathrm{i}\varepsilon_{\lambda\mu\nu}(\lambda,\mu,\nu=1,2,3)$时,式(11.2.3)自然满足. 证明如下:利用 Jacobi 恒等式可将

式(11.2.2)左端第二项改写，即

$$
\begin{aligned}
[J_\lambda,[J_\mu,I_\nu]]-[I_\lambda,[J_\mu,J_\nu]] &= [J_\lambda,[J_\mu,I_\nu]]+[J_\mu,[J_\nu,I_\lambda]]+[J_\nu,[I_\lambda,J_\mu]] \\
&= \mathrm{i}\epsilon_{\mu\nu\sigma}[J_\lambda,J_\sigma]+\mathrm{i}\epsilon_{\nu\lambda\sigma}[J_\mu,J_\sigma]+\mathrm{i}\epsilon_{\lambda\mu\sigma}[J_\nu,J_\sigma].
\end{aligned} \tag{11.2.7}
$$

在 λ,μ,ν 三个指标中有两个相等时(例 $\lambda=\mu$)，上式三项中有一项为 0(例如第三项)，而其他两项抵消. 当 λ,μ,ν 各不相同时，以第一项为例，它的求和指标 σ 必须等于 λ 才能使 $\epsilon_{\mu\nu\sigma}$ 不为 0，但此时对易子却等于 0. 其他两项也是一样. 结论是：当 $\lambda,\mu,\nu=1,2,3$ 时，式(11.2.3)左端恒为 0. 考虑式(11.2.3)右端在 $C_{\lambda\mu\nu}=\mathrm{i}\epsilon_{\lambda\mu\nu}$ ($\lambda,\mu,\nu=1,2,3$)时的情况，先设固定指标 λ,μ,ν 各不相同. 求和指标 α,β,γ 必须彼此不同且分别等于 λ,μ,ν 其中之一，否则 $a_{\lambda\mu\nu\alpha\beta\gamma}$(简称 a)为 0. a 不为 0 的组合只有 $\alpha=\mu,\beta=\nu,\gamma=\lambda$ 或 $\alpha=\nu,\beta=\lambda,\gamma=\mu$. 因此式(11.2.3)右方是

$$
\begin{aligned}
& a_{\lambda\mu\nu\alpha\beta\gamma}\{I_\alpha,I_\beta,I_\gamma\} \\
&= \frac{\mathrm{i}^3}{24}\epsilon_{\lambda\mu\nu}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\epsilon_{\nu\lambda\mu}\epsilon_{\nu\lambda\mu}\{I_\mu,I_\nu,I_\lambda\}+\frac{\mathrm{i}^3}{24}\epsilon_{\lambda\nu\mu}\epsilon_{\mu\lambda\nu}\epsilon_{\nu\mu\lambda}\epsilon_{\mu\nu\lambda}\{I_\nu,I_\lambda,I_\mu\}.
\end{aligned}
$$

以 λ,μ,ν 为标准次序，则第一项系数为 $\mathrm{i}^3/24$，第二项系数为 $-\mathrm{i}^3/24$. 由于 $\{I_\mu,I_\nu,I_\lambda\}$ 是对称组合，故两项抵消为 0. 设 λ,μ,ν 中有一对指标相等，如 $\lambda=\mu\neq\nu$. 令与 λ,ν 不等的第三个指标为 σ. $a_{\lambda\nu\alpha\beta\gamma}$ 式右方的四个反对称张量中第一个因子可以是 $\epsilon_{\lambda\sigma\nu}$ 或是 $\epsilon_{\lambda\nu\sigma}$，第四个因子三个指标必须完全不同(否则它为 0)，要求第一个与第二个因子的最后一个指标必须不同. 因此相应第一个因子的两种选择，第二个因子是 $\epsilon_{\lambda\nu\sigma}$ 与 $\epsilon_{\lambda\sigma\nu}$ (其第一个指标为 λ，因为设定 $\lambda=\mu$). 第四个因子相应地是 $\epsilon_{\nu\sigma\lambda}$ 与 $\epsilon_{\nu\sigma\lambda}$，而第三个因子对两种选择都是 $\epsilon_{\nu\sigma\lambda}$. 因此

$$
\begin{aligned}
& a_{\lambda\lambda\nu\alpha\beta\gamma}\{I_\alpha,I_\beta,I_\gamma\} \\
&= \frac{\mathrm{i}^3}{24}(\epsilon_{\lambda\sigma\nu}\epsilon_{\lambda\nu\sigma}\epsilon_{\nu\sigma\lambda}\epsilon_{\nu\sigma\lambda}\{I_\sigma,I_\nu,I_\sigma\}+\epsilon_{\lambda\nu\sigma}\epsilon_{\lambda\sigma\nu}\epsilon_{\nu\sigma\lambda}\epsilon_{\sigma\nu\lambda}\{I_\nu,I_\sigma,I_\sigma\}).
\end{aligned}
$$

两项的全反对称张量中，三对是相同的，第四对符号相反，而{}内是对称组合，彼此相等，故上式为 0. 如 $\lambda=\mu=\nu$，则 σ,τ,ρ 彼此不同但任何一个又都不能等于 λ 的要求无法实现，因此至少有一个 ϵ 张量为 0，即 $a_{\lambda\lambda\lambda\alpha\beta\gamma}\{I_\alpha,I_\beta,I_\gamma\}=0$. 以上证明了，对 $SL(2)$ 式(11.2.3)是 $0=0$.

考虑 $SL(2)$ 情况下的式(11.2.6). 其左方四个固定指标，两两成对：(λ,μ) 与 (σ,τ). 如有一对指标相等，例如 $\lambda=\mu$，则左方为 0. 式(11.2.6)右方的第一项 $a_{\lambda\lambda\alpha\beta\gamma}C_{\sigma\tau\nu}\{I_\alpha,I_\beta,I_\gamma\}=0$，原因和以上分析式(11.2.3) $\lambda=\mu$ 情况时相同；而第二项 $\epsilon_{\lambda\lambda\nu}=0$，原因自明. $\sigma=\tau$ 时情况类似. 此时式(11.2.6)又是 $0=0$.

如前一对中的一个指标和后一对中一个指标相等，例如 $\lambda=\tau$，则另两个指标可以相等 $(\sigma=\mu)$，也可以不相等 $(\sigma\neq\mu)$. 当 $\lambda=\tau$ 时式(11.2.6)左方为

$$
[[J_\lambda,J_\mu],[I_\sigma,J_\lambda]]+[[J_\sigma,J_\lambda],[I_\lambda,J_\mu]],
$$

用 $\boldsymbol{I}$ 与 $\boldsymbol{J}$ 分量的对易关系，上式变为

$$
\mathrm{i}\epsilon_{\sigma\lambda\rho}[J_\rho,[J_\mu,J_\lambda]]+\mathrm{i}\epsilon_{\lambda\mu\rho}[J_\rho,[J_\lambda,J_\sigma]], \tag{11.2.8}
$$

以上 λ,μ,σ 是固定指标，ρ 是求和指标. 第一项不为 0 的条件是 $\sigma\neq\lambda\neq\rho,\mu\neq\lambda$. 因此求和指标 ρ 必须为 μ. 第二项不为 0 的条件是 $\lambda\neq\mu\neq\rho,\lambda\neq\sigma$，因此 ρ 必须为 σ. 以上两项之和的不为 0 部分是(在 $\sigma\neq\mu$ 条件下)

$$
\begin{aligned}
& \mathrm{i}\epsilon_{\sigma\lambda\mu}[J_\mu,[J_\mu,J_\lambda]]+\mathrm{i}\epsilon_{\lambda\mu\sigma}[J_\sigma,[J_\lambda,J_\sigma]] \\
&= \mathrm{i}\epsilon_{\lambda\mu\sigma}([J_\mu,[J_\mu,J_\lambda]]+[J_\sigma,[J_\lambda,J_\sigma]]), \quad \sigma\neq\mu.
\end{aligned}
$$

要注意的一点是，上式没有求和指标. 重复的指标没有求和意义. 当 $\mu=\sigma$ 时式(11.2.8)变为

$$2\mathrm{i}\epsilon_{\lambda\mu\rho}[J_\rho,[J_\lambda,J_\mu]],\quad \sigma=\mu.$$

总结以上，式(11.2.6)在 $\lambda=\tau$ 时，其左方等于

$$\begin{cases}\mathrm{i}\epsilon_{\lambda\mu\sigma}([J_\mu,[J_\mu,J_\lambda]]+[J_\sigma,[J_\lambda,J_\sigma]]), & \sigma\neq\mu;\\ 2\mathrm{i}\epsilon_{\lambda\mu\rho}[J_\rho,[J_\lambda,J_\mu]], & 对\ \rho\ 求和, \sigma=\mu.\end{cases}$$

相应地，在 $\lambda=\tau$ 时式(11.2.6)右方等于

$$\mathrm{i}(a_{\lambda\mu\nu\alpha\beta\gamma}\epsilon_{\sigma\lambda\nu}+a_{\sigma\lambda\nu\alpha\beta\gamma}\epsilon_{\lambda\mu\nu})\{I_\alpha,I_\beta,J_\gamma\}.$$

注意到 λ,μ,σ 是固定指标，ν,α,β,γ 是求和指标. 将 a 的定义式(11.2.4)代入，进行求和并用式(11.1.6)，得

$$\begin{cases}\frac{\mathrm{i}}{24}\epsilon_{\lambda\mu\sigma}(\{I_\sigma,I_\lambda,J_\sigma\}-\{I_\mu,I_\lambda,J_\mu\}+\{I_\mu,I_\mu,J_\lambda\}-\{I_\sigma,I_\sigma,J_\lambda\}), & \sigma\neq\mu;\\ \frac{\mathrm{i}}{24}2\epsilon_{\lambda\mu\rho}(\{I_\rho,I_\lambda,J_\mu\}-\{I_\mu,I_\rho,J_\lambda\}), & \sigma=\mu.\end{cases}$$

考虑到 $\{I_\alpha,I_\beta,J_\gamma\}$ 是对称组合，则式(11.2.6)给出

$$[J_\nu,[J_\lambda,J_\mu]]=\frac{1}{4}(J_\mu I_\lambda-I_\mu J_\lambda)I_\nu, \tag{11.2.9}$$

$$[J_\mu,[J_\lambda,J_\mu]]-[J_\nu,[J_\lambda,J_\nu]]=\frac{1}{4}(I_\nu I_\lambda J_\nu-I_\mu I_\lambda J_\mu+I_\mu I_\lambda J_\mu-I_\nu I_\lambda J_\nu). \tag{11.2.10}$$

在上式中 λ,μ,ν 均为固定指标 1,2,3.

式(11.2.6)的两对指标(λ,μ)与(σ,τ)中如令 $\lambda=\sigma$，或 $\mu=\sigma$，或 $\mu=\tau$，所导致的结果与上面讨论的 $\lambda=\tau$ 情况同. 如用$(+,-,3)$分量表示，则式(11.2.6)，式(11.2.10)可以写作 5 个关系式：

$$[J_3,[J_+,J_-]]=\frac{1}{4}(J_-I_+-I_-J_+)I_3, \tag{11.2.11}$$

$$[J_+,[J_3,J_+]]=\frac{1}{4}I_+(J_+I_3-I_+J_3), \tag{11.2.12}$$

$$[J_-,[J_3,J_-]]=\frac{1}{4}I_-(J_-I_3-I_-J_3), \tag{11.2.13}$$

$$2[J_3,[J_3,J_+]]+[J_+,[J_+,J_-]]=\frac{1}{4}(2I_3(J_+I_3-I_+J_3)+I_+(J_+I_--I_+J_-)), \tag{11.2.14}$$

$$2[J_3,[J_3,J_+]]+[J_-,[J_-,J_+]]=\frac{1}{4}(2I_3(J_-I_3-I_-J_3)+I_-(J_-I_+-I_-J_+)). \tag{11.2.15}$$

将 $J_\alpha\to\frac{1}{2}J_\alpha$ 重新标度并考虑到 $J_3(J_-I_+-I_-J_+)=(I_+J_--J_+I_-)J_3$ 等关系，则式(11.2.11)～式(11.2.15)正是式(11.1.17)～式(11.1.20). 由(11.2.2)式与 Jacobi 恒等式，可证式(11.2.11)～式(11.2.15)诸式中只有一个是独立的.

以上的讨论表明，式(11.2.1)，式(11.2.2)，式(11.2.3)与式(11.2.6)是 Drinfeld 给出的一般的 Yangian 对易关系，它适用于任何简单李代数，而在 $SL(2)$情况 $C_{\lambda\mu\nu}=\mathrm{i}\epsilon_{\lambda\mu\nu}(\lambda,\mu,\nu=1,2,3)$就简化为氢原子中角动量算符 $\boldsymbol{L}$ 以及 $\boldsymbol{J}=\frac{1}{2\mathrm{i}}\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{B}$ 所满足的代数关系，即氢原子的 $\boldsymbol{L},\boldsymbol{J}$ 算符是 $Y(SL(2))$的一个简单实现.

11.3 $Y(SL(2))$在量子力学中的其他实现

本节内容源于文献[4].

从 Yangian 的基本关系(式(11.1.13),式(11.1.14),式(11.1.18)或式(11.1.17))出发,容易得到:如果 I_α 与 $J_\alpha(\alpha=+,-,3)$满足 $Y(SL(2))$的对易关系,则 I_α 与 $-J_\alpha$ 必满足 Yangian. 同时,I_α,$\mu I_\alpha+J_\alpha$ 也满足 Yangian. 由于式(11.1.14),式(11.1.17),式(11.1.18)诸式只含奇数个 J_α,因而 I_α 与 $-J_\alpha$ 满足 Yangian 是显然的. 在式(11.1.14)中将 $J_\pm$ 作平移,$J_\pm\to J_\pm+\mu I_\pm$,μ 为任意参数或 Yangian 的 Casimir 算符,得到

$$\begin{aligned}[I_3,J_\pm+\mu I_\pm]&=[I_3,J_\pm]+\mu[I_3,I_\pm]\\&=\pm J_\pm\pm\mu I_\pm=\pm(J_\pm+\mu I_\pm).\end{aligned}$$

式(11.1.14)在 $J_\pm$ 平移后关系仍然保持. 考察式(11.1.18),$[J_+,J_-]$在平移以后为

$$[J_++\mu I_+,J_-+\mu I_-]=[J_+,J_-]+2\mu^2I_3+4\mu J_3,$$

再算$[J_3+\mu I_3,[J_++\mu I_+,J_-+\mu I_-]]$,给出 $\mu[I_3,[J_+,J_-]]+[J_3,[J_+,J_-]]$. 因此对易子$[J_3,[J_+,J_-]]$在平移后增量为 $\mu[I_3,[J_+,J_-]]$,用 Jacobi 恒等式,它变为

$$-\mu[J_+,[J_-,I_3]]-\mu[J_-,[I_3,J_+]]=-\mu([J_+,J_-])+([J_-,J_+])=0,$$

式(11.1.18)右方在平移时增量为

$$\mu(I_+I_--I_+I_-)I_3=0.$$

类似地可以证明式(11.1.17)在 J_α 作平移时不变. 下面讨论 $Y(SL(2))$几个实现的例子.

1. 二角动量系统

任意两个角动量算符 $\boldsymbol{j}_1$ 和 $\boldsymbol{j}_2$,且其总角动量为 $\boldsymbol{I}$:

$$\boldsymbol{I}=\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_2,\tag{11.3.1}$$

并定义

$$\boldsymbol{J}=-\mathrm{i}\boldsymbol{j}_1\times\boldsymbol{j}_2.\tag{11.3.2}$$

其中 $\boldsymbol{j}_1,\boldsymbol{j}_2$ 满足对易关系

$$[j_i^\alpha,j_j^\beta]=\mathrm{i}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}j_i^\gamma\delta_{ij},\quad i,j=1,2.\tag{11.3.3}$$

由于任意 $\boldsymbol{j}_1$ 分量与任意 $\boldsymbol{j}_2$ 分量对易,因此总角动量分量满足 $SL(2)$对易关系(式(11.1.13)). 下面验证式(11.1.14):

$$\begin{aligned}\mathrm{i}[I_\alpha,J_\beta]&=[j_1^\alpha+j_2^\alpha,\epsilon_{\beta\sigma\tau}j_1^\sigma j_2^\tau]\\&=\epsilon_{\beta\sigma\tau}([j_1^\alpha,j_1^\sigma]j_2^\tau+j_1^\sigma[j_2^\alpha,j_2^\tau])\\&=\mathrm{i}\epsilon_{\beta\sigma\tau}(\epsilon_{\alpha\sigma\rho}j_1^\rho j_2^\tau+\epsilon_{\alpha\tau\rho}j_1^\sigma j_2^\rho)\\&=\mathrm{i}(j_1^\alpha j_2^\beta-j_1^\beta j_2^\alpha),\end{aligned}$$

即有

$$[I_\alpha,I_\beta]=\mathrm{i}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\gamma.\tag{11.3.4}$$

式(11.1.17)、式(11.1.18)验证如下

$$\begin{aligned}[J_\alpha,J_\beta]&=-\epsilon_{\alpha\rho\sigma}\epsilon_{\beta\mu\nu}[j_1^\rho j_2^\sigma,j_1^\mu j_2^\nu]\\&=-\epsilon_{\alpha\rho\sigma}\epsilon_{\beta\mu\nu}([j_1^\rho,j_1^\mu]j_2^\sigma j_2^\nu+j_1^\rho j_1^\mu[j_2^\sigma,j_2^\nu])\\&=-\mathrm{i}\epsilon_{\alpha\rho\sigma}\epsilon_{\beta\mu\nu}(\epsilon_{\rho\mu\tau}j_1^\tau j_2^\sigma j_2^\nu+\epsilon_{\sigma\nu\tau}j_1^\rho j_1^\mu j_2^\tau)\end{aligned}$$

$$= \mathrm{i}\epsilon_{\alpha\rho\sigma}(j_1^\beta j_2^\sigma j_2^\rho - \delta_{\beta\rho} j_2^\sigma (\boldsymbol{j}_1 \cdot \boldsymbol{j}_2) + \delta_{\alpha\beta} j_1^\rho (\boldsymbol{j}_1 \cdot \boldsymbol{j}_2) - j_1^\rho j_1^\sigma j_2^\beta).$$

在以上的步骤中用了对易子的展开：

$$[AB,CD] = [A,C]BD + B[A,D]C + A[B,C]D + AC[B,D],$$

以及 $\boldsymbol{j}_1, \boldsymbol{j}_2$ 的对易关系，进一步简化要用到

$$\epsilon_{\alpha\rho\sigma} j^\rho j^\sigma = \frac{1}{2}\epsilon_{\alpha\rho\sigma}[j^\rho, j^\sigma] = \frac{\mathrm{i}}{2}\epsilon_{\alpha\rho\sigma}\epsilon_{\rho\sigma\tau} j^\tau$$
$$= \mathrm{i} j^\alpha.$$

将式(11.2.16)定义的 $(I_1)^2 + (I_2)^2 + (I_3)^2$ 记为 $\boldsymbol{I}^2$，则得

$$[J_\alpha, J_\beta] = -\mathrm{i}\epsilon_{\alpha\beta\sigma}(\boldsymbol{j}_1 \cdot \boldsymbol{j}_2)\boldsymbol{I}^2 + \mathrm{i}(j_1^\alpha j_2^\beta - j_2^\alpha j_1^\beta). \tag{11.3.5}$$

定义式(11.2.17)导致 $\mathrm{i}\epsilon_{\alpha\beta\gamma} J^\gamma = \mathrm{i}(j_1^\alpha j_2^\beta - j_2^\alpha j_1^\beta)$，此外还有 $\boldsymbol{j}_1 \cdot \boldsymbol{j}_2 = \frac{1}{2}[\boldsymbol{I}^2 - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)] \equiv \frac{1}{2}(\boldsymbol{I}^2 - \zeta)$，最后得到

$$[J_\alpha, J_\beta] = -\epsilon_{\alpha\beta\sigma} J_\sigma - \frac{\mathrm{i}}{2}\epsilon_{\alpha\beta\sigma}(\boldsymbol{I}^2 - \zeta) I_\sigma. \tag{11.3.6}$$

用(+，−，3)分量表示，有

$$\left.\begin{aligned} [J_3, J_\pm] &= \pm\left\{J_\pm - \frac{\mathrm{i}}{2}(\boldsymbol{I}^2 - \zeta) I_\pm\right\}, \\ [J_+, J_-] &= 2J_3 - (\boldsymbol{I}^2 - \zeta) I_3. \end{aligned}\right\} \tag{11.3.7}$$

用式(11.1.15)最后得出

$$\left.\begin{aligned} [J_3, [J_+, J_-]] &= [J_3, \boldsymbol{I}^2] I_3 = (J_+ I_- - I_+ J_-) I_3, \\ [J_\pm, [J_3, J_\pm]] &= \mp\frac{\mathrm{i}}{2}[J_\pm, \boldsymbol{I}^2 I_\pm] = (I_3 J_\pm - J_3 I_\pm) I_\pm. \end{aligned}\right\} \tag{11.3.8}$$

与式(11.1.17)、式(11.1.18)相同.

考虑两个自旋 1/2 组成的系统，$\boldsymbol{I} = \boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2$. $\boldsymbol{J}$ 的分量是

$$\left.\begin{aligned} J_3 &= \frac{1}{2}(S_1^+ S_2^- - S_1^- S_2^+), \\ J_\pm &= \pm(S_1^3 S_2^\pm - S_1^\pm S_2^3). \end{aligned}\right\} \tag{11.3.9}$$

如在定义 $\boldsymbol{I}$ 与 $\boldsymbol{J}$(+，−)分量时采用另一种归一的方式：

$$J_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(J_1 \pm \mathrm{i} J_2),$$

它的分量以 S_1, S_2 表示就是(另记为 Q_3 及 $Q_\pm$)

$$\left.\begin{aligned} Q_3 &= S_1^+ S_2^- - S_1^- S_2^+, \\ Q_\pm &= \pm\frac{1}{\sqrt{2}}(S_1^3 S_2^\pm - S_1^\pm S_2^3). \end{aligned}\right\} \tag{11.3.10}$$

在系统的总自旋状态的关系中，算符 $\boldsymbol{Q}$ 具有直接的物理意义. 以 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 表示自旋 1 与 2 的 z 分量(量子化轴方向分量)分别为 +1/2 与 −1/2，其余类推. 系统总自旋可以为 1(分量 1，0，−1)，即三重态，也可以为 0(分量 0)，即单态. 三重态的波函数是

$$\left.\begin{aligned} \Psi_{1,1} &= |\uparrow\uparrow\rangle, \\ \Psi_{1,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \\ \Psi_{1,-1} &= |\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned}\right\} \tag{11.3.11}$$

Ψ 的两个下标分别表示总自旋及其 z 分量. 单态波函数是

$$\Psi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \tag{11.3.12}$$

S^+ 和 S^- 分别是自旋 z 分量的升与降算符:

$$\left.\begin{aligned} S^+|\downarrow\rangle &= |\uparrow\rangle, \quad S^+|\uparrow\rangle = 0; \\ S^-|\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle, \quad S^-|\downarrow\rangle = 0. \end{aligned}\right\} \tag{11.3.13}$$

在三重态的三个状态之间, $I^+ = S_1^+ + S_2^+$ 与 $I^- = S_1^- + S_2^-$ 正是自旋 z 分量的升与降算符, 在三重态与单态之间进行变换的"跃迁算符"正是 $Q^\pm$ 与 Q^3, 考虑将 Q^+ 作用于 $\Psi_{1,-1}$:

$$\begin{aligned} Q^+ \Psi_{1,-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(S_1^3 S_2^+ - S_1^+ S_2^3)|\downarrow\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-|\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ &= \Psi_{0,0}. \end{aligned}$$

$I^\pm$ 与 $Q^\pm$, Q^3 对自旋态的变换示于图 11.1. 更复杂的自旋系统也可以引入多个 $\boldsymbol{J}$ 算符

$$\hat{\boldsymbol{J}}_{ik} = -\mathrm{i}\boldsymbol{S}_i \times \boldsymbol{S}_k,$$

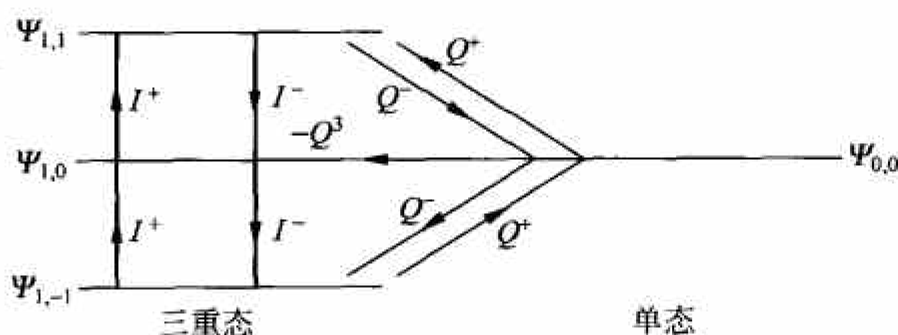


图 11.1 体系总自旋态间的升、降算符

以实现不同权的多重态间的跃迁. 自旋角动量与轨道角动量的耦合也可以用同法处理:

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{j}_1 &= \boldsymbol{L}, \quad \boldsymbol{j}_2 = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}, \\ \boldsymbol{I} &= \boldsymbol{L} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}, \\ \boldsymbol{J} &= -\mathrm{i}\boldsymbol{L} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}. \end{aligned}\right\} \tag{11.3.14}$$

2. 转动(角动量)与平移(动量)结合的 $\boldsymbol{J}$ 算符

将 $(L_1)^2 + (L_2)^2 + (L_3)^2$ 仍简写为 $\boldsymbol{L}^2$, 则

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{I} &= \boldsymbol{L}, \\ \boldsymbol{J} &= \boldsymbol{L}^2 \boldsymbol{p}. \end{aligned}\right\} \tag{11.3.15}$$

也是 $Y(SL(2))$ 的生成元. 由于坐标 $\boldsymbol{r}$ 与 $\boldsymbol{L}$ 的对易关系

$$[L_\alpha, r_\beta] = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} r_\gamma \tag{11.3.16}$$

与 $\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{L}$ 的对易关系

$$[L_\alpha, p_\beta] = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} p_\gamma \tag{11.3.17}$$

相同, 因此 $\boldsymbol{I} = \boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L}^2 \boldsymbol{r}$ 也满足 Yangian. 以下给出式(11.3.15)满足 Yangian 的证明.

$\boldsymbol{I}$ 与 $\boldsymbol{J}$ 间的对易关系很简单:

$$[I_\alpha, J_\beta] = [L_\alpha, \boldsymbol{L}^2 p_\beta] = \mathrm{i}\boldsymbol{L}^2 \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} p_\gamma = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} J_\gamma.$$

在计算 $[J_\alpha, J_\beta]$ 中将会遇到 $[\boldsymbol{L}^2, p_\beta]$, 它是

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{L}^2, p_\beta] &= L_\alpha[L_\alpha, p_\beta] + [L_\alpha, p_\beta]L_\alpha \\ &= \mathrm{i}\epsilon_{\alpha\beta\sigma}(L_\alpha p_\sigma + p_\sigma L_\alpha) \\ &= -2\mathrm{i}\epsilon_{\beta\alpha\sigma}L_\alpha p_\sigma - 2p_\beta.\end{aligned} \tag{11.3.18}$$

$\boldsymbol{J}$ 分量间的对易关系计算如下：

$$\begin{aligned}[J_\alpha, J_\beta] &= [\boldsymbol{L}^2 p_\alpha, \boldsymbol{L}^2 p_\beta] = \boldsymbol{L}^2[\boldsymbol{L}^2, p_\beta]p_\alpha + \boldsymbol{L}^2[p_\alpha, \boldsymbol{L}^2]p_\beta \\ &= 2\mathrm{i}\boldsymbol{L}^2(\epsilon_{\alpha\mu\nu}L_\mu p_\nu p_\beta - 2\mathrm{i}p_\alpha p_\beta - \alpha\leftrightarrow\beta).\end{aligned}$$

注意到 $\alpha\leftrightarrow\beta$ 意为对指标 α,β 进行反对称化，$p_\alpha p_\beta$ 对指标反对称化时得 0，因 p_α 与 p_β 对易，因此

$$[J_\alpha, J_\beta] = 2\mathrm{i}\boldsymbol{L}^2(\epsilon_{\alpha\mu\nu}L_\mu p_\nu p_\beta - \alpha\leftrightarrow\beta).$$

式中 α 与 β 是固定指标，μ 与 ν 为求和指标. 我们只关心 $\alpha\neq\beta$ 的情况. 在 $\epsilon_{\alpha\mu\nu}$ 的指标各不相同时(否则为 0)，或有 $\mu=\beta$，或有 $\nu=\beta$，因此

$$[J_\alpha, J_\beta] = 2\mathrm{i}\boldsymbol{L}^2(\epsilon_{\alpha\beta\nu}L_\beta p_\nu p_\beta + \epsilon_{\alpha\mu\beta}L_\mu p_\beta p_\beta - \alpha\leftrightarrow\beta).$$

将指标反对称化明确写出，并用 ϵ 对指标的反对称性质，最后有

$$[J_\alpha, J_\beta] = 2\mathrm{i}\boldsymbol{L}^2\epsilon_{\alpha\beta\nu}[(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{p})p_\nu - L_\nu\boldsymbol{p}^2]. \tag{11.3.19}$$

继续计算时，以下关系是有用的：

$$\left.\begin{aligned}&[\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{p}, L_\alpha] = 0, \quad [\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{p}, p_\alpha] = 0, \\ &[\boldsymbol{p}^2, L_\alpha] = 0, \\ &[\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{p}, J_\alpha] = [\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{p}, \boldsymbol{L}^2 p_\alpha] = 0.\end{aligned}\right\} \tag{11.3.20}$$

从式(11.3.19)，可得

$$[J_+, J_-] = -2\mathrm{i}[J_1, J_2] = 4\boldsymbol{L}^2[(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{p})p_3 - L_3\boldsymbol{p}^2],$$

以下的计算是直接的：

$$\begin{aligned}[J_3, [J_+, J_-]] &= -4[\boldsymbol{L}^2 p_3, \boldsymbol{L}^2\boldsymbol{p}^2 L_3] = -4\boldsymbol{L}^2[p_3, \boldsymbol{L}^2]\boldsymbol{p}^2 L_3 \\ &= -8\boldsymbol{L}^2\boldsymbol{p}^2 L_3(\mathrm{i}(L_1 p_2 - L_2 p_1) + p_3).\end{aligned}$$

从另一方面，有

$$\begin{aligned}I_3(J_- I_+ - I_- J_+) &= I_3(I_+ J_- - I_- J_+ - 2J_3) \\ &= -2L_3\boldsymbol{L}^2(\mathrm{i}(L_1 p_2 - L_2 p_1) + p_3).\end{aligned}$$

因此得

$$[J_3, [J_+, J_-]] = 4\boldsymbol{p}^2 I_3(J_- I_+ - I_- J_+). \tag{11.3.21}$$

类似地可以得到

$$\begin{aligned}[J_\pm, [J_3, J_\pm]] &= 4\boldsymbol{p}^2\boldsymbol{L}^2 L_\pm(-L_\pm p_3 + L_3 p_\pm \mp p_\pm) \\ &= 4\boldsymbol{p}^2 I_\pm(J_\pm I_3 - I_\pm J_3).\end{aligned} \tag{11.3.22}$$

由于 $\boldsymbol{p}^2$ 是代数的 Casimir 算符，$4\boldsymbol{p}^2$ 因子可以用重新定义 $\boldsymbol{J}$ 的方式消去，至此 $SL(2)$ Yangian 代数关系已全部验证完毕.

11.4 长程相互作用的一维链模型[5,6]

N 个自旋算符($s=1/2$)位于 N 个一维链的格点上，不同格点上的自旋算符对易：

$$[S_i^\alpha, S_j^\beta] = 0, \quad i\neq j. \tag{11.4.1}$$

自旋 1/2 的条件给出

$$(S_i^+)^2 = (S_i^-)^2 = 0. \tag{11.4.2}$$

I 与 **J** 构造如下：

$$\left.\begin{aligned}
I_\alpha &= \sum_{i=1}^{N} S_i^\alpha, \quad \alpha = +, -, 3, \\
J_\pm &= \mp \sum_{i\neq j}^{N} w_{ij} S_i^\pm S_j^3 = \pm \sum_{i\neq j}^{N} w_{ij} S_i^3 S_j^\pm, \\
J_3 &= \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N} w_{ij} S_i^+ S_j^-.
\end{aligned}\right\} \tag{11.4.3}$$

此处 ω_{ij} 满足

$$\left.\begin{aligned}
\omega_{ij} &= -\omega_{ji}, \\
\Delta_{ijk} &= w_{ij}w_{jk} + w_{jk}w_{ki} + w_{ki}w_{ij} = -1.
\end{aligned}\right\} \tag{11.4.4}$$

$J_\pm$ 的写法是与不同格点自旋算符对易以及 w_{ij} 的反对称性质相一致的，w_{ij} 体现了长程相互作用. 满足式(11.4.4)最简单的解是

$$w_{ij} = \begin{cases} 1, & i > j, \quad i,j = 1,2,\cdots,N, \\ 0, & i = j, \quad i,j = 1,2,\cdots,N, \\ -1, & i < j, \quad i,j = 1,2,\cdots,N. \end{cases} \tag{11.4.5}$$

为了验证这样定义的 **I** 与 **J** 满足 Yangian 条件，计算

$$\begin{aligned}
[J_3, J_+] &= \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l} w_{ij}w_{kl}[S_i^+S_j^-, S_k^+S_l^3] \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l} w_{ij}w_{kl}(S_i^+S_k^+S_j^-\delta_{lj} - 2S_i^+S_j^3S_l^3\delta_{jk} - S_k^+S_i^+S_j^-\delta_{il}) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l} w_{ij}(2w_{jk}S_i^+S_j^3S_k^3 + (w_{jk}+w_{ki})S_i^+S_k^+S_j^-).
\end{aligned} \tag{11.4.6}$$

进一步用式(11.4.6)计算$[J_+, [J_3, J_+]]$：

$$\begin{aligned}
[J_+, [J_3, J_+]] &= \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l,m} w_{ij}w_{lm}[S_l^+S_m^3, 2w_{jk}S_i^+S_j^3S_k^3 + (w_{jk}+w_{ki})S_i^+S_k^+S_j^-] \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l,m} w_{ij}w_{lm}\{S_l^+[2w_{jk}S_i^+S_j^3S_k^3\delta_{mi} + (w_{jk}+w_{ki}) \\
&\quad \cdot(\delta_{im}+\delta_{km}-\delta_{jm})S_i^+S_k^+S_j^-] + [-2w_{jk}(\delta_{jl}S_i^+S_j^+S_k^3 + \delta_{kl}S_i^+S_j^3S_k^+) \\
&\quad + 2(w_{jk}+w_{ki})\delta_{jl}S_i^+S_k^+S_j^3]S_m^3\} \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l,m} w_{ij}\{2w_{jk}w_{li}S_i^+S_l^+S_j^3S_k^3 + (w_{jk}+w_{ki})(w_{li}+w_{lk}-w_{lj}) \\
&\quad \cdot S_i^+S_k^+S_l^+S_j^- - 2w_{jk}w_{jl}S_i^+S_j^+S_k^3S_l^3 - 2w_{jk}w_{kl}S_i^+S_j^3S_k^+S_l^3 \\
&\quad + 2(w_{jk}+w_{ki})w_{jl}S_i^+S_k^+S_j^3S_l^3\} \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l,m}\{(2w_{il}w_{lk}w_{ji} - 2w_{ij}w_{jk}w_{jl} - 2w_{ik}w_{kj}w_{jl} \\
&\quad + 2w_{ik}(w_{kj}+w_{ji})w_{kl})S_i^+S_j^+S_k^3S_l^3 \\
&\quad + w_{ij}(w_{jk}+w_{ki})(w_{li}+w_{lk}-w_{lj})S_i^+S_k^+S_l^+S_j^-\}.
\end{aligned}$$

注意在求和号内作为 $S_k^3S_l^3$ 的系数，l 和 k 指标可以互换：

$$w_{ik}w_{ji}w_{kl} \xlongequal{k\leftrightarrow l} w_{il}w_{ji}w_{lk},$$

得

$$[J_+,[J_3,J_+]] = -\frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l}\{2(2w_{il}w_{ji}w_{lk} - w_{ij}w_{jk}w_{jl} - w_{ik}w_{jl}w_{kj} + w_{ik}w_{kj}w_{kl})S_i^+S_j^+S_k^3S_l^3$$
$$+ w_{ij}(w_{jk}+w_{ki})(w_{li}+w_{lk}-w_{lj})S_i^+S_k^+S_l^+S_j^-\}. \tag{11.4.7}$$

在右方第一项的系数中，注意到在求和号内作为对称算符乘积 $S_i^+S_j^+$，$S_k^3S_l^3$ 的系数，指标可以互换：

$$w_{ji}w_{kl}w_{li} \xlongequal{k\leftrightarrow l} w_{ji}w_{ik}w_{kl},$$
$$-w_{ij}w_{jk}w_{jl} \xlongequal{i\leftrightarrow j} w_{ji}w_{li}w_{ik},$$

于是在式(11.4.7)中下式成立：

$$2w_{il}w_{ji}w_{lk} - w_{ij}w_{jk}w_{jl} = w_{ji}(w_{ik}w_{kl}+w_{kl}w_{li}+w_{li}w_{ik})$$
$$= w_{ji}\Delta_{ikl}.$$

作为 $S_i^+S_j^+S_k^3S_l^3$ 的系数，i,j 和 k,l 各自可以互换，有

$$w_{ik}w_{lj}w_{kl} \xlongequal[k\leftrightarrow l]{i\leftrightarrow j} -w_{ik}w_{lj}w_{kl},$$

因此

$$\sum_{i,j,k,l} w_{ik}w_{lj}w_{kl}S_i^+S_j^+S_k^3S_l^3 = 0.$$

这导致

$$w_{ik}w_{jl}w_{kj} - w_{ik}w_{kj}w_{kl} = w_{ik}(w_{jk}w_{kl}+w_{kl}w_{lj}+w_{lj}w_{jk}) - w_{ik}w_{lj}w_{kl}$$
$$= w_{ik}\Delta_{jkl} - w_{ik}w_{lj}w_{kl},$$

Δ 的定义是式(11.4.4)。

在式(11.4.7)右方第二项的系数中，

$$w_{ij}(w_{jk}+w_{ki})(w_{lj}+w_{lk}-w_{lj})$$
$$= w_{lk}(w_{ij}w_{jk}+w_{jk}w_{ki}+w_{ki}w_{ij}) - w_{lk}w_{jk}w_{ki}$$
$$+ w_{ij}(w_{jk}+w_{ki})w_{li} - w_{lj}w_{ij}(w_{jk}+w_{ki})$$
$$= w_{lk}\Delta_{ijk} - w_{li}w_{ji}w_{jk} + w_{ij}w_{jk}w_{li} + w_{lj}w_{ij}w_{ki}$$
$$- w_{lj}w_{ij}w_{jk} - w_{lj}w_{ij}w_{ki},$$

作 i,l,k 循环置换，上式等于

$$w_{lk}\Delta_{ijk} + w_{jk}w_{li}w_{ij} + w_{jk}w_{ij}w_{jl} + w_{jk}w_{jl}w_{li}$$
$$= w_{lk}\Delta_{ijk} + w_{jk}\Delta_{ijl}.$$

将以上计算的两项系数代入式(11.4.7)，则有

$$[J_+,[J_3,J_+]] = -\frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l}\{2(w_{ji}\Delta_{ikl} - w_{ik}\Delta_{jkl})S_i^+S_j^+S_k^3S_l^3$$
$$+ (w_{lk}\Delta_{ijk} + w_{jk}\Delta_{ijl})S_i^+S_k^+S_l^+S_j^-\}, \tag{11.4.8}$$

其中

$$\Delta_{ijk} \equiv w_{ij}w_{jk} + w_{jk}w_{ki} + w_{ki}w_{ij}.$$

由式(11.2.12)，现在计算

$$I_+(I_3J_+-J_3I_+)=I_+(J_+I_3-I_+J_3)$$
$$=-\sum_{i,j,k,l}\left\{w_{jk}S_i^+S_j^+S_k^3S_l^3+\frac{1}{2}w_{kl}S_i^+S_j^+S_k^+S_l^-\right\}$$
$$=-\sum_{i,j,k,l}w_{jk}\left\{S_i^+S_j^+S_k^3S_l^3-\frac{1}{2}S_i^+S_k^+S_l^+S_j^-\right\}. \tag{11.4.9}$$

如果要求式(11.1.17)成立，即要求$[J_+,[J_3,J_+]]=I_+(I_3J_+-J_3I_+)$，则要求式(11.4.8)等于式(11.4.9)，即

$$\frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l}\{2(w_{ji}\Delta_{ikl}-w_{ik}\Delta_{jkl})S_i^+S_j^+S_k^3S_l^3+(w_{lk}\Delta_{ijk}+w_{jk}\Delta_{ijl})S_i^+S_k^+S_l^+S_j^-\}$$
$$=\sum_{i,j,k,l}w_{jk}\left\{S_i^+S_j^+S_k^3S_l^3-\frac{1}{2}S_i^+S_k^+S_l^+S_j^-\right\}, \tag{11.4.10}$$

以下证明它是成立的.

当 $i\neq j\neq k\neq l$ 时，取 $\Delta_{ijk}=-1$，则有 $\Delta_{ikl}=\Delta_{jkl}=-1$，必有

$$\sum_{\substack{i,j,k,l\\ i\neq j\neq k\neq l}}(w_{ik}-w_{ji}-w_{jk})S_i^+S_j^+S_k^3S_l^3=0.$$

因为 $w_{ji}=-w_{ij}$，而 $S_i^+S_j^+$ 对 i,j 为对称，将上式括号中第三项与括号外因子的对 j 求和换为对 i 求和，则 $w_{jk}\to w_{ik}$. 同理

$$\sum_{\substack{i,j,k,l\\ i\neq j\neq k\neq l}}(w_{lk}-w_{jk}-w_{jk})S_i^+S_k^+S_l^+S_j^-=0.$$

于是在 $\Delta_{ijk}=-1$ 条件下，式(11.1.17)成立.

当 $i\neq j\neq k$ 时，式(11.4.9)的左端给出

$$\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j,l\\ i\neq j\neq l}}\{2(w_{ji}\Delta_{iil}S_i^+S_i^3S_j^+S_l^3+(w_{ji}\Delta_{ijl}-w_{ij}\Delta_{jjl})S_i^+S_j^+S_j^3S_l^3)$$
$$+w_{ij}\Delta_{ijj}S_i^+S_j^+S_j^-S_l^+\}$$
$$+\sum_{\substack{i,j,l\\ i\neq j\neq k}}\{2(w_{ji}\Delta_{iki}-w_{jk}\Delta_{ijk})S_i^+S_i^3S_j^+S_k^3$$
$$+2(w_{ji}\Delta_{ikj}-w_{ik}\Delta_{jkj})S_i^+S_j^+S_j^3S_k^3$$
$$+2(w_{ji}\Delta_{ikk}-w_{jk}\Delta_{jkk})S_i^+S_j^+(S_k^3)^2$$
$$+(w_{jk}\Delta_{ijk}-w_{jk}\Delta_{ijj})S_i^+S_k^+S_j^+S_j^-\}$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j,l\\ i\neq j\neq k}}\{2(w_{ji}\Delta_{iik}+w_{ij}\Delta_{ijk}-w_{ji}\Delta_{iik}+w_{ji}\Delta_{iki}$$
$$-\Delta_{jk}\Delta_{ijk}+w_{ij}\Delta_{ijk}-w_{jk}\Delta_{iik})S_i^+S_i^3S_j^+S_k^3$$
$$+2(w_{ji}\Delta_{ikk}-w_{ik}\Delta_{ikk})S_i^+S_j^+(S_k^3)^2$$
$$+(w_{kj}\Delta_{ijj}+w_{jk}\Delta_{ijk}+w_{jk}\Delta_{ijj})S_i^+S_k^+S_j^+S_j^-\}$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j,l\\ i\neq j\neq k}}\{2(2w_{ij}\Delta_{ijk}-w_{jk}\Delta_{ijk}-w_{jk}(w_{ij}w_{jk}+w_{jk}w_{ki}$$
$$+w_{ki}w_{ij})-w_{ik}w_{ij}w_{jk})S_i^+S_i^3S_j^+S_k^3$$
$$-2w_{ik}(w_{ij}w_{jk}+w_{jk}w_{ki}+w_{ki}w_{ij})S_i^+S_j^+(S_k^3)^2$$
$$+w_{jk}\Delta_{ijk}S_i^+S_k^+S_j^+S_j^-\}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j,l\\ i\neq j\neq k}}\{2((2w_{ij}-w_{jk}-w_{ik})\Delta_{ijk}-w_{ij}w_{ik}w_{jk})S_i^+S_i^3S_j^+S_k^3 \\
&\quad - w_{ij}\Delta_{ijk}S_i^+S_j^+(S_k^3)^2+w_{ij}\Delta_{ijk}S_i^+S_k^+S_j^+S_j^-\} \\
&= \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j,l\\ i\neq j\neq k}}\{(w_{jk}+w_{ik})\Delta_{ijk}S_i^+S_j^+S_k^3 \\
&\quad - 2w_{ik}\Delta_{ijk}S_i^+S_j^+(S_k^3)^2+w_{jk}\Delta_{ijk}S_i^+S_k^+S_j^+S_j^-\}.
\end{aligned}
\tag{11.4.11}
$$

上面已用到了对自旋 1/2 有下述等式成立：

$$
S_i^+S_i^3=-\frac{1}{2}S_i^+,
$$

$$
\sum_{\substack{i,j,l\\ i\neq j\neq k}}w_{ij}w_{ik}w_{jk}S_i^+S_j^+S_k^3=0.
$$

现在考虑式(11.4.10)的右端，即

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\substack{i,j,l\\ i\neq j\neq k,l}}w_{jk}\{S_i^+S_j^+S_k^3S_l^3-\frac{1}{2}S_i^+S_k^+S_l^+S_j^-\} \\
&= \sum_{\substack{i,j,l\\ i\neq j\neq k}}\Big\{w_{ji}S_i^+S_j^+S_i^3S_k^3+w_{jk}S_i^+S_i^3S_j^+S_k^3+w_{jk}S_i^+S_j^+S_j^3S_k^3 \\
&\quad + w_{jk}S_i^+S_j^+(S_k^3)^2-\frac{1}{2}w_{jk}S_i^+S_k^+S_j^+S_j^-\Big\} \\
&= \sum_{\substack{i,j,l\\ i\neq j\neq k}}\{(w_{ji}+w_{jk}+w_{ik})S_i^+S_i^3S_j^+S_k^3 \\
&\quad + 2w_{jk}S_i^+S_j^+(S_k^3)^2-\frac{1}{2}w_{jk}S_i^+S_k^+S_j^+S_j^-\} \\
&= -\frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j,l\\ i\neq j\neq k}}\{(w_{jk}+w_{ik})S_i^+S_j^+S_k^3-2w_{ik}S_i^+S_j^+(S_k^3)^2 \\
&\quad + w_{jk}S_i^+S_k^+S_j^+S_j^-\}.
\end{aligned}
\tag{11.4.12}
$$

比较式(11.4.11)与式(11.4.12)，亦即式(11.4.10)的两端，在 $i\neq j\neq k$ 情况下，两端相等的条件是

$$
\Delta_{ijk}=1.
$$

于是我们在各种可能的指标求和均考虑在内时证明了式(11.4.3)满足 $Y(SL(2))$ 的对易关系.

容易验证，满足式(11.4.4)的 w_{jk} 的参数化解为

$$
w_{jk}=\frac{z_j+z_k}{z_{jk}},\quad z_{jk}=z_j-z_k. \tag{11.4.13}
$$

将式(11.4.13)代入式(11.4.4)验证，有

$$
\begin{aligned}
\Delta_{ijk} &= \frac{1}{z_{ij}z_{jk}z_{ki}}\{(z_i+z_j)(z_j+z_k)z_{ki}+(z_i+z_k)(z_j+z_k)z_{ij} \\
&\quad + (z_i+z_k)(z_i+z_j)z_{jk}\} \\
&= \frac{1}{z_{ij}z_{jk}z_{ki}}(z_j^2z_{ki}+z_k^2z_{ij}+z_i^2z_{jk})=-1.
\end{aligned}
$$

当选择

$$z_k = \exp\left(\mathrm{i}k\,\frac{2\pi}{N}\right) \tag{11.4.14}$$

时，则

$$w_{jk} = \mathrm{i}\cot(j-k)\,\frac{\pi}{N}, \tag{11.4.15}$$

与之相应的 J_a 是

$$J_a = -\mathrm{i}\sum_{\substack{j,k \\ j\neq k}}^{N}\cot\frac{(j-k)\pi}{N}\epsilon_{a\beta\gamma}S_j^\beta S_k^\gamma. \tag{11.4.16}$$

它对应一个长程相互作用模型. 在 J 的构成中，不同的一对格点 j 和 k 的系数 $\cot\dfrac{(j-k)\pi}{N}$ 不同，它与两格点的间距有关. 这个模型是一个长程相互作用模型.

11.5 Hubbard 模型[7]

令 a_j 与 b_j 代表在 j 格点处消灭自旋 1/2 与 −1/2 粒子的 Fermi 算符，$a_j^\dagger$ 与 $b_j^\dagger$ 是相应的产生算符. 它们满足反对易关系

$$\left.\begin{aligned} \{a_j, a_k^\dagger\} &= \delta_{jk}, \\ \{b_j, b_k^\dagger\} &= \delta_{jk}, \\ \{a_j, b_k\} &= \{a_j, b_k^\dagger\} = 0. \end{aligned}\right\} \tag{11.5.1}$$

格点上以及体系总的自旋算符都可以用这些算符表示：

$$\left.\begin{aligned} S^+ &= \sum_{j=1}^{N} a_j^\dagger b_j, \\ S^- &= \sum_{j=1}^{N} b_j^\dagger a_j, \\ S^3 &= \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}(a_j^\dagger a_j - b_j^\dagger b_j), \end{aligned}\right\} \tag{11.5.2}$$

它们满足对易关系

$$[S^3, S^\pm] = \pm S^\pm, \quad [S^+, S^-] = 2S^3. \tag{11.5.3}$$

这很容易从 a,b 算符的反对易关系式(11.5.1)以及 S 算符的构成(式(11.5.2))证明，仍定义 S^a 为 I^a：

$$I^a = S^a, \tag{11.5.4}$$

而 J^a 的构成为

$$\left.\begin{aligned} J_+ &= \sum_{i,j}\theta_{ij}a_i^\dagger b_j - U\sum_{\substack{i,j \\ i\neq j}}\epsilon_{ij}I_i^+ I_j^3, \\ J_- &= \sum_{i,j}\theta_{ij}b_i^\dagger a_j + U\sum_{\substack{i,j \\ i\neq j}}\epsilon_{ij}I_i^- I_j^3, \\ J_3 &= \frac{1}{2}\sum_{i,j}\theta_{ij}(a_i^\dagger a_j - b_i^\dagger b_j) + U\sum_{i,j}\epsilon_{ij}I_i^+ I_j^-, \end{aligned}\right\} \tag{11.5.5}$$

其中

$$\left.\begin{aligned} \theta_{ij} &= \delta_{i,j-1} - \delta_{i,j+1}, \\ \varepsilon_{ij} &= \begin{cases} 1, & i > j, \\ 0, & i = j, \\ -1, & i < j. \end{cases} \end{aligned}\right\} \tag{11.5.6}$$

式(11.5.5)右方含 U 的项正是 $\sum_{i\neq j} \boldsymbol{S}_i \times \boldsymbol{S}_j$，而包含 θ_{ij} 的项称为“巡游”项(hopping term)：从一个格点移向相邻的一个格点.巡游项只能用算符 a,b 表示，而不能由整体算符 $\boldsymbol{S}$ 表示.证明 $\boldsymbol{I}$ 与 $\boldsymbol{J}$ 满足 Yangian,计算较为繁琐,以下仅给出证明的要点[7].

$\boldsymbol{I}$ 与 $\boldsymbol{J}$ 分量间的对易关系可以用 a,b 间对易关系式(11.5.1)以及对易子展开：

$$\begin{aligned} [AB,C] &= A[B,C] + [A,C]B \\ &= A\{B,C\} - \{A,C\}B, \end{aligned}$$

得到证明.

$\boldsymbol{J}$ 分量间的对易子 $[J_3, J_\pm]$ 经过直接计算,结果是

$$[J_3, J_\pm] = A_\pm + UB_\pm + U^2 C_\pm, \tag{11.5.7}$$

其中

$$\begin{aligned} A_+ &= \sum_{i,k,l} \theta_{ij}\theta_{jk} a_i^\dagger b_k, \\ B_+ &= -\frac{1}{2}\sum_{i,j,k}\theta_{ij}\left\{(\varepsilon_{jk} + \varepsilon_{ik}) a_i^\dagger b_j I_k^3 + \frac{1}{2}(3\varepsilon_{kj} - \varepsilon_{ki}) I_k^+ a_i^\dagger a_j \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2}(\varepsilon_{kj} - 3\varepsilon_{ki}) I_k^+ b_i^\dagger b_j \right\}, \\ C_+ &= \frac{1}{2}\sum_{i,j,k}\varepsilon_{ij}\{2\varepsilon_{jk} I_i^+ I_j^3 I_k^3 + (\varepsilon_{ki} - \varepsilon_{kj}) I_i^+ I_k^+ I_j^-\}, \\ A_- &= -(A_+)^+, \quad B_- = -(B_+)^+, \\ C_- &= -\frac{1}{2}\sum_{i,j,k}\varepsilon_{ij}\{2\varepsilon_{jk} I_i^- I_j^3 I_k^3 + (\varepsilon_{ki} - \varepsilon_{kj}) I_i^- I_k^- I_j^+\}. \end{aligned}$$

利用 Jacobi 恒等式,有

$$[[J_3, J_-], I_+] + [[J_-, I_+], J_3] + [[I_+, J_3], J_-] = 0,$$

第二项中 $[J_-, I_+] = -2J_3$,故它为 0,第三项中 $[I_+, J_3] = -J_+$,因此恒等式变为

$$[J_+, J_-] = [[J_3, J_-], I_+].$$

直接计算得

$$[J_+, J_-] = A_3 + UB_3 + U^2 C_3, \tag{11.5.8}$$

其中

$$\begin{aligned} A_3 &= \sum_{i,j,k}\theta_{ij}\theta_{jk}(a_i^\dagger a_k - b_i^\dagger b_k), \\ B_3 &= -\frac{1}{2}\sum_{i,j,k}\theta_{ij}\{(\varepsilon_{jk} + \varepsilon_{ik})(b_i^\dagger a_j I_k^+ - a_i^\dagger b_j I_k^-) \\ &\quad + 2(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{jk})(a_i^\dagger a_j - b_i^\dagger b_j) I_k^3\}, \\ C_3 &= -\frac{1}{2}\sum_{i,j,k}\varepsilon_{ij}\{2\varepsilon_{jk} I_i^3 I_j^3 I_k^3 + (\varepsilon_{ki} - \varepsilon_{kj}) I_i^- I_j^+ I_k^3\}. \end{aligned}$$

在式(11.5.7)基础上可算出

$$[J_+,[J_3,J_+]] = \mathscr{A}+U\mathscr{B}+U^2\mathscr{C}+U^3\mathscr{D}, \tag{11.5.9}$$

其中

$$\mathscr{A}=0,\quad \mathscr{B}=0,$$

$$\begin{aligned}\mathscr{C}=&-\frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l}\Big\{(\bar{\Delta}_{ijk}+\bar{\Delta}_{ikl}+\varepsilon_{kl}\varepsilon_{li}+\varepsilon_{ij}\varepsilon_{jk}+\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl}-\varepsilon_{jk}\varepsilon_{il})\\&\cdot I_i^+a_j^\dagger b_l I_k^3+I_i^+I_k^+\Big[\Big(\varepsilon_{il}(\varepsilon_{ik}+\varepsilon_{kl})+\frac{1}{2}(\varepsilon_{jk}-3\varepsilon_{lk})\\&\cdot\Big(\varepsilon_{ki}+\frac{1}{2}(\varepsilon_{il}-\varepsilon_{ij})\Big)\Big)a_j^\dagger a_l+\Big(\varepsilon_{ij}(\varepsilon_{ki}-\varepsilon_{kj})+\frac{1}{2}(3\varepsilon_{jk}-\varepsilon_{lk})\\&\cdot\Big(\varepsilon_{ki}-\frac{1}{2}(\varepsilon_{il}-\varepsilon_{ij})\Big)\Big)b_j^\dagger b_l\Big]\Big\}-\frac{1}{4}\sum_{i,j,k}\theta_{jk}(\varepsilon_{ij}\varepsilon_{jk}+\varepsilon_{jk}\varepsilon_{ki})I_i^+a_j^\dagger b_k,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathscr{D}=&\frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l}\{2(\varepsilon_{jl}-\varepsilon_{kl})\bar{\Delta}_{ijk}I_i^+I_j^+I_k^3I_l^3\\&+(\varepsilon_{jl}-\varepsilon_{jk})\bar{\Delta}_{ikl}I_i^+I_j^+I_k^{*}I_l^+\},\end{aligned}$$

此处

$$\bar{\Delta}_{ijk}=\varepsilon_{ij}\varepsilon_{jk}+\varepsilon_{jk}\varepsilon_{ki}+\varepsilon_{ki}\varepsilon_{ij}.$$

应与式(11.5.9)相比的是

$$I_+(I_3J_+-J_3I_+)=D_++UE_+, \tag{11.5.10}$$

计算结果是

$$D_+=\sum_{i,j,k,l}\theta_{jl}\Big\{I_i^+a_j^\dagger b_l I_k^3+\frac{1}{2}I_i^+I_k^+(b_j^\dagger b_l-a_j^\dagger a_l)\Big\},$$

$$E_+=-\sum_{i,j,k,l}\varepsilon_{jl}\Big\{I_i^+I_j^+I_l^3I_k^3+\frac{1}{2}I_i^+I_k^+I_j^+I_l^-\Big\}.$$

比较的结果发现

$$D_+=\mathscr{C},\quad E_+=\mathscr{D},$$

从而导致

$$[J_+,[J_3,J_+]]=U^2I_+(I_3J_--J_3I_+). \tag{11.5.11}$$

其他关系也可以类似地得出.

Hubbard 模型的 Hamilton 量是

$$\begin{aligned}H=&-\sum_{i=1}^{N}(a_i^\dagger a_{i+1}+a_{i+1}^\dagger a_i+b_i^\dagger b_{i+1}+b_{i+1}^\dagger b_i)\\&-U\sum_{i=1}^{N}\Big(a_i^\dagger a_i-\frac{1}{2}\Big)\Big(b_i^\dagger b_i-\frac{1}{2}\Big).\end{aligned} \tag{11.5.12}$$

可以证明 Yangian 生成元(式(11.5.4)、式(11.5.5))与 H 对易(当 N 为无穷时),即一维无穷 Hubbard 链具有 $Y(SL(2))$ 对称性. 将式(11.5.12)改写:

$$H=-\sum_i\tau_{ij}(a_i^\dagger a_j+b_i^\dagger b_j)-U\Big(\sum_i\Big(a_i^\dagger a_ib_i^\dagger b_i-\frac{1}{4}\Big)-\frac{N}{2}\Big), \tag{11.5.13}$$

其中

$$\tau_{ij}=\delta_{i+1,j}-\delta_{i-1,j}.$$

可以直接证明

$$\left[\sum_i \tau_{ij}(a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j), I_+\right] = \sum_i \tau_{ij}(a_i^\dagger b_j - a_i^\dagger b_j) = 0,$$

$$\left[\sum_i a_i^\dagger a_i b_i^\dagger b_i, I_+\right] = \sum_i (a_i^\dagger b_i - a_i^\dagger b_i) = 0,$$

故有$[H,I_+]=0$. 再由$[H,I_-]=-[H,I_+]^+$以及 Jacobi 恒等式可证$[H,I_-]=0$, $[H,I_3]=0$.

$[H,\boldsymbol{J}]=0$ 的证明以$[H,J_+]$为例:

$$[H,J_+]=-\left[\sum_{i,j}^N \tau_{ij}(a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j), \sum_{k,l}^N \theta_{kl} a_k^\dagger b_l\right] + U\left\{\left[\sum_{i,j}^N \tau_{ij}(a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j), \sum_{k,l}^N \varepsilon_{kl} I_k^+ I_l^3\right]\right.$$
$$\left. - \left[\sum_i^N a_i^\dagger a_i b_i^\dagger b_i, \sum_{j,k}^N \theta_{jk} a_j^\dagger b_k\right]\right\} + U^2\left[\sum_i^N a_i^\dagger a_i b_i^\dagger b_i, \sum_{j,k}^N \varepsilon_{jk} I_j^+ I_k^3\right]. \tag{11.5.14}$$

当链长 $N\to\infty$时,可以通过具体计算证明式(11.5.14)中 U 的零次幂与二次幂项系数为零,而U 的一次幂的系数由两项构成,分别是

$$\left[\sum_{i,j}\tau_{ij}(a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j), \sum_{k,l}\varepsilon_{kl} I_k^+ I_l^3\right]$$
$$=\sum_{i,j,k}\tau_{ij}\left\{(\varepsilon_{jk}-\varepsilon_{ik})a_i^\dagger b_j I_k^3 + \frac{1}{2}(\varepsilon_{jk}-\varepsilon_{ki}) I_k^+ (a_i^\dagger a_j - b_i^\dagger b_j)\right\}$$
$$=\sum_{i,k}\left\{(\varepsilon_{i+1,k}-\varepsilon_{ik})a_i^\dagger b_{i+1} I_k^3 + (\varepsilon_{i-1,k}-\varepsilon_{ik})a_i^\dagger b_{i-1} I_k^3\right.$$
$$\left. + \frac{1}{2}(\varepsilon_{k,i+1}-\varepsilon_{ki}) I_k^+(a_i^\dagger a_{i+1} - b_i^\dagger b_{i+1}) + \frac{1}{2}(\varepsilon_{k,i-1}-\varepsilon_{ki}) I_k^+(a_i^\dagger b_{i-1} - b_i^\dagger b_{i-1})\right\}$$
$$=-\frac{1}{2}\sum_i\{a_i^\dagger b_{i+1}(b_i b_i^\dagger - b_i^\dagger b_i) - a_i^\dagger b_{i+1} + a_i^\dagger b_{i-1}(b_i^\dagger b_i - b_i b_i^\dagger)$$
$$+ a_i^\dagger b_{i-1} - a_i^\dagger b_{i+1} a_{i+1}^\dagger a_{i+1} + a_i^\dagger b_{i-1} a_{i-1}^\dagger a_{i-1}\}$$
$$=\sum_i a_i^\dagger\{(b_{i+1}-b_{i-1})b_i^\dagger b_i - b_{i+1}a_{i+1}^\dagger a_{i+1} + b_{i-1}a_{i-1}^\dagger a_{i-1}\},$$

以及

$$-\left[\sum_i a_i^\dagger a_i b_i^\dagger b_i, \sum_{j,k}\theta_{jk} a_j^\dagger b_k\right]$$
$$=-\sum_{i,j}\theta_{ij}\{a_i^\dagger b_j b_i^\dagger b_i - a_i^\dagger b_j a_j^\dagger a_j\}$$
$$=-\sum_i a_i^\dagger\{b_{i+1}(b_i^\dagger b_i - a_{i+1}^\dagger a_{i+1}) - b_{i-1}(b_i^\dagger b_i - a_{i-1}^\dagger a_{i-1})\}$$
$$=-\sum_i a_i^\dagger\{(b_{i+1}-b_{i-1})b_i^\dagger b_i - b_{i+1}a_{i+1}^\dagger a_{i+1} + b_{i-1}a_{i-1}^\dagger a_{i-1}\},$$

它们正好彼此抵消. 其他对易子$[H,J_-]$,$[H,J_3]$也类似地可以证明为零. 这个例子表明,李代数(如 $SL(2)$)描述了局域转动,而 Yangian 描述了转动与巡游的结合.

以上举出了一些具体实现 Yangian 的例子,有单体的形式,也有多体的形式. 有的是一次量子化的,有的是二次量子化的. Yangian 关系仅规定算符的对易关系,因此在具体实现中允许有相当大的选择自由度. Yangian 是一种新的对称性运算,它包含李代数为其子代数,并有组成无穷维代数的机制. 例如在 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}^2\boldsymbol{p}$ 或 $\boldsymbol{j}=\boldsymbol{L}^2\boldsymbol{r}$ 中,$\boldsymbol{L}^2$ 是转动不变的,而 $\boldsymbol{p}$ 则是平移算符,它已超出转动操作的范围. 从 Hubbard 模型的 $\boldsymbol{J}$(式(11.3.43))看,既有表征同一格点处转动的张量算符 $\boldsymbol{S}_i\times\boldsymbol{S}_j$,又有在不同格点间的巡游项,它导致了无限维代数结构.

另一方面,多格点的移动都可以由一个格点逐步移动所实现.这使我们可以理解 Yangian 的本质:它是无穷维代数,但由有限个生成元构成.两组基本的生成元 $\boldsymbol{I}$ 与 $\boldsymbol{J}$ 决定了所有更高阶算符的行为.这种现象来源于系统存在某种强烈限制,并非每阶的元素都是独立的;而这种限制又是很巧妙的,即只有 $\boldsymbol{I}$ 与 $\boldsymbol{J}$ 才是独立的生成元.当然并非任意系统都有 Yangian,但有一大类模型与 Yangian 相关,下一章介绍的 Yang-Baxter 系统就提供了这类模型的例子.

本章开始从量子力学中的一个例子——氢原子——引出了 Yangian 代数.我们在下面两章将要看到,它和物理学中许多模型和现象有关.

11.6　$SL(3)$一维表示和八维表示间的 Yangian 跃迁

在 11.3 节我们证明了 $Y(SL(2))$算符能引起自旋单态和三重态间的跃迁.这个概念很容易推广到 $SL(3)$.在基本粒子物理学的课程中我们学到基本粒子的 $SL(3)$对称性.

$SL(3)$代数由下式定义

$$[F_\lambda, F_\mu] = \mathrm{i} f_{\lambda\mu\nu} F_\nu, \tag{11.6.1}$$

此处 $\lambda,\mu,\nu=1,2,\cdots,8$,结构常数 $f_{\lambda\mu\nu}$ 对任意两个指标是反对称的:

$$\begin{gathered} f_{123} = 1,\ f_{458} = f_{678} = \frac{\sqrt{3}}{2}, \\ f_{147} = f_{246} = f_{257} = f_{345} = - f_{156} = - f_{367} = \frac{1}{2}. \end{gathered} \tag{11.6.2}$$

$SL(3)$的三维表示是由 Gell-mann 矩阵$\boldsymbol{\lambda}_\nu = 2\boldsymbol{F}_\nu$ 构成的,它们是 Pauli 矩阵的推广:

$$\boldsymbol{\lambda}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\lambda}_2 = \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\lambda}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{\lambda}_4 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \boldsymbol{\lambda}_5 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & 0 & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\lambda}_6 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{\lambda}_7 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}, \boldsymbol{\lambda}_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix}.$$

定义

$$\begin{gathered} I_\pm = F_1 \pm \mathrm{i} F_2,\ U_\pm = F_6 \pm \mathrm{i} F_7,\ V_\pm = F_4 \mp \mathrm{i} F_5, \\ I_3 = F_3, Y = \frac{2}{\sqrt{3}} F_8. \end{gathered} \tag{11.6.3}$$

$SL(3)$的对易关系可以写作以下形式:

$$\begin{gathered} [I_3, I_\pm] = \pm I_\pm, [I_+, I_-] = 2I_3, [I_8, I_\alpha] = 0(\alpha = \pm, 3), \\ [I_3, U_\pm] = \mp \frac{1}{2} U_\pm, [I_8, U_\pm] = \pm U_\pm, [U_+, U_-] = - I_3 + \frac{3}{2} I_8, \\ [I_3, V_\pm] = \mp \frac{1}{2} V_\pm, [I_8, V_\pm] = \mp V_\pm, [V_+, V_-] = - \left(I_3 + \frac{3}{2} I_8 \right), \end{gathered}$$

$$[I_\pm,U_\mp]=[U_\pm,V_\mp]=[V_\pm,I_\mp]=0, \qquad (11.6.4)$$
$$[I_\pm,U_\pm]=\pm U_\mp,[U_\pm,V_I]=\pm I_\pm,[V_\pm,I_\pm]=\pm U_\pm.$$

通过以下符号

$$U_3=-\frac{1}{2}I_3+\frac{3}{4}I_8\ V_3=-\frac{1}{2}I_3-\frac{3}{4}I_8, \qquad (11.6.5)$$

我们得到

$$\begin{aligned}&[U_3,U_\pm]=\pm U_\pm,[U_+,U_-]=2U_3,\\&[V_3,V_\pm]=\pm V_\pm,[V_+,V_-]=2V_3\end{aligned} \qquad (11.6.6)$$

以及

$$Q=I_3+\frac{1}{2}Y, \qquad (11.6.7)$$

此处 Q 是电荷算符,Y 是超荷. 夸克和反夸克组成介子,例如,η^0(属于八维表示)以及 $\eta^{0'}$(一维表示). 二者均具有 $I=I_3=Y=Q=0$:

$$|\eta^0\rangle=\frac{1}{\sqrt{6}}(-|u\bar{u}\rangle-|d\bar{d}\rangle+2|s\bar{s}\rangle), \qquad (11.6.8)$$

$$|\eta^{0'}\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}(|u\bar{u}\rangle+|d\bar{d}\rangle+|s\bar{s}\rangle), \qquad (11.6.9)$$

此处 $|u\bar{u}\rangle=|u\rangle_1|\bar{u}\rangle_2$. 其他介子也由以下夸克和反夸克组成.

$$\begin{aligned}
&|u\rangle: I=\frac{1}{2},\quad I_3=\frac{1}{2},\quad Y=\frac{1}{3},\quad Q=\frac{2}{3};\\
&|d\rangle: I=\frac{1}{2},\quad I_3=-\frac{1}{2},\quad Y=\frac{1}{3},\quad Q=-\frac{1}{3};\\
&|s\rangle: I=0,\quad I_3=0,\quad Y=-\frac{2}{3},\quad Q=-\frac{1}{3};\\
&|\bar{u}\rangle: I=\frac{1}{2},\quad I_3=-\frac{1}{2},\quad Y=-\frac{1}{3},\quad Q=-\frac{2}{3};\\
&|\bar{d}\rangle: I=\frac{1}{2},\quad I_3=\frac{1}{2},\quad Y=-\frac{1}{3},\quad Q=\frac{1}{3};\\
&|\bar{s}\rangle: I=0,\quad I_3=0,\quad Y=\frac{2}{3},\quad Q=\frac{1}{3}.
\end{aligned} \qquad (11.6.10)$$

有关的算符导致夸克之间的转换

$$\begin{aligned}&I_+|d\rangle=|u\rangle,I_-|u\rangle=|d\rangle,V_-|d\rangle=|s\rangle,\\&U_+|s\rangle=|d\rangle,V_+|u\rangle=|s\rangle,V_-|s\rangle=|u\rangle.\end{aligned} \qquad (11.6.11)$$

我们定义算符

$$I_\lambda=\sum_i F_i^\lambda, \qquad (11.6.12)$$

$$J_\lambda=\sum_{i=1}^N \mu_i F_i^\lambda+\beta f_{\lambda\mu\nu}\sum_{i\neq j}^N W_{ij}F_i^\mu F_j^\nu \quad (W_{ij}=-W_{ji}), \qquad (11.6.13)$$

此处

$$[F_i^\lambda,F_j^\mu]=if_{\lambda\mu\nu}F^\nu\delta_{ij}, \qquad (11.6.14)$$

指标 i 代表夸克的味. 将式(11.6.12)和式(11.6.13)代入 11.2 节的 Yangian 对易关系,注

意到这些关系和 $SL(2)$ 的不同，式(11.6.12)和式(11.6.13)满足 $Y(SL(3))$ 的充分条件：

(1) $A_{ijk}=W_{ij}W_{jk}+W_{jk}W_{ki}+W_{ki}W_{ij}=-1$（对重复指标不求和 $i\neq j\neq k, W_{ij}=-W_{ji}$）；

(2) F_i^λ 取 Gell-mann 矩阵（基础表示）；

(3) μ_i 是任意参数.

用以下的符号

$$\begin{aligned}&\bar{I}_{\pm}=J_1\pm \mathrm{i}J_2,\quad \bar{v}_{\pm}=J_6\pm \mathrm{i}J_7,\quad \bar{V}_{\pm}=J_4\pm \mathrm{i}J_5\\&\bar{I}_3=J_3,\quad \bar{I}_8=\frac{2}{\sqrt{3}}J_8,\end{aligned}\tag{11.6.15}$$

并设 $\beta=-\mathrm{i}\rho$，$Y(SL(3))$ 可以充分得到实现

$$\begin{aligned}&I_{\pm}=\sum_{i=1}I_i^{\pm},v_{\pm}=\sum_i U_i^{\pm},v_{\pm}=\sum_i V_i^{\pm},I_3=\sum_i I_i^3,I_8=\sum_i I_i^8,\\&\bar{I}_{\pm}=\sum_{i=1}^N\mu_i I_i^{\pm}\mp 2\rho\sum_{i\neq j}^N W_{ij}\left(I_i^{\pm}I_j^3+\frac{1}{2}U_i^{\mp}V_j^{\mp}\right),\\&\bar{U}_{\pm}=\sum_i\mu_i V_j^{\pm}\pm\rho\sum_{i\neq j}W_{ij}\left[V_j^{\pm}\left(I_j^3-\frac{3}{2}Y_j\right)+I_i^{\mp}V_j^{\mp}\right],\\&\bar{V}_{\pm}=\sum_i\mu_i V_i^{\pm}\pm\rho\sum_{i\neq j}W_{ij}\left[V_i^{\pm}\left(I_j^3+\frac{3}{2}Y_j\right)+U_i^{\mp}I_j^{\mp}\right],\\&\bar{I}_3=\sum_i\mu_i I_i^3+\rho\sum_{i\neq j}W_{ij}\left[I_i^+I_j^--\frac{1}{2}(U_i^+U_j^-+V_i^+V_j^-)\right],\\&\bar{I}_8=\sum_i\mu_i Y_i+\rho\sum_{i\neq j}W_{ij}[U_i^+U_j^--V_i^+V_j^-].\end{aligned}\tag{11.6.16}$$

对于 $N=2$，即有两个夸克，我们设 $W_{12}=1(W_{21}=-1)$. 将 $\bar{I}_8$ 作用于 $|\eta^0\rangle$ 得到

$$\begin{aligned}\bar{I}_8|\eta^0\rangle&=-\frac{1}{3}(\mu_1-\mu_2)|\eta^0\rangle-\frac{\sqrt{2}}{3}(\mu_1-\mu_2+3\rho)|\eta^{0'}\rangle\\&=\sqrt{r^2-4\rho r+6\rho^2}(\cos\theta|\eta^0\rangle+\sin\theta|\eta^{0'}\rangle),\end{aligned}\tag{11.6.17}$$

此处 $r=\mu_2-\mu_1$ 以及 $\cos\theta=\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{r}{\sqrt{r^2-4\rho r+6\rho^2}}$.

式(11.6.17)告诉我们 $\bar{I}_8$ 导致从 $|\eta^0\rangle$ 到混合态 $|\eta^0\rangle$ 和 $|\eta^{0'}\rangle$ 的跃迁. 它是和二自旋 $-\frac{1}{2}$ 粒子体系 Ψ_{10} 到 Ψ_{00} 跃迁相对应的.

参考文献

[1] Jimbo M. Yang-Baxter Equation in Integrable Systems. Singapore: World Scientific, 1990

[2] 葛墨林，薛康. 杨-巴克斯特方程的物理含义. 上海：上海科技教育出版社，1999

[3] Drinfeld V G. Soviet Math Dokl, 1985, 32: 254

[4] Ge M L, Xue K, Cho Y M. Phys Lett, 1998, A 249: 358

[5] Haldane F D M. Phys Rev Lett, 1988, 60: 635

[6] Shastry S. Phys Rev Lett, 1988, 60: 639

[7] Uglov D B, Korepin V E. Phys Lett, 1994, A190: 238

第 12 章
RTT 关系与 Yang-Baxter 方程

在上一章中我们从氢原子引出了 Yangian，又讨论了几个实现 Yangian 的例子. 这种代数结构的存在是有深刻根源并和一个普遍的原则相联系的. 氢原子问题很简单，因为它是线性问题. Yangian 的重要性恰恰在于它本质上反映了一大类非线性模型的特点，对非线性问题，其严格解常常不能由微扰解叠加而得到. 在低维情况下，对一些模型已经有办法得到严格解. 最好能有一个原则性的理论，它一方面能给出式(11.1.13)，式(11.1.14)，式(11.1.17)，式(11.1.18)一类对易关系，而同时又能给出构造 Hamilton 量的原则，这样就在更深入的层次上建立了新型代数关系与 Hamilton 守恒系统的联系. 为了使讨论具有普遍性，最好不涉及对易括号的具体实现形式，而进行与模型无关的讨论.

12.1 对易关系的矩阵直乘形式

本节内容基于文献[1]，[2].

量子力学中最基本的对易关系是 x,p 这对共轭力学量间的对易关系($\hbar=1$)：

$$[x_\alpha, p_\beta] = \mathrm{i}\delta_{\alpha\beta}, \tag{12.1.1}$$

从此导出其他一些力学量间的对易关系，例如

$$[L_\alpha, L_\beta] = \mathrm{i}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}L_\gamma, \tag{12.1.2}$$

这是角动量分量间的对易关系，还有

$$[L_\alpha, x_\beta] = \mathrm{i}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}L_\gamma,$$
$$[L_\alpha, p_\beta] = \mathrm{i}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}p_\gamma,$$

等. 在量子场论中，相应式(12.1.1)的正则对易关系对不同的场形式也有不同. 例如对标量场有

$$[\varphi(\boldsymbol{x},t), \dot{\varphi}(\boldsymbol{y},t)] = \delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}), \tag{12.1.3}$$

对旋量场则有

$$[\psi_\alpha(\boldsymbol{x},t), \psi_\beta^+(\boldsymbol{y},t)] = \delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})\delta_{\alpha\beta}, \tag{12.1.4}$$

等等. 能否构造一种对易关系的普遍框架，它能涵盖各种可能的形式，作为它自身的实现？

对易关系的核心在于算符的先后次序. 可以引入一个 2×2 矩阵 $\boldsymbol{L}$，它的矩阵元都是量子力学算符. 为区别两个矩阵的次序可引入一个参数 u，例如 $\boldsymbol{L}(u)$先、$\boldsymbol{L}(v)$后不同于 $\boldsymbol{L}(v)$

先、$\boldsymbol{L}(u)$后：

$$\boldsymbol{L}(u)=\begin{bmatrix}L_{11}(u) & L_{12}(u)\\ L_{21}(u) & L_{22}(u)\end{bmatrix}. \tag{12.1.5}$$

矩阵所张的空间称为"辅助空间",每个元素都是作用于 Hilbert 空间的量子力学算符.为了使前面的矩阵的任一个元素都有机会和后面矩阵的任一个元素形成乘积,应采用直积.矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 直积 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}$ 的定义是

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12}\\ a_{21} & a_{22}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}b_{11} & b_{12}\\ b_{21} & b_{22}\end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}=\begin{array}{c} \\ 11\\ 12\\ 21\\ 22\end{array}\begin{array}{c}\begin{array}{cccc}11 & 12 & 21 & 22\end{array}\\ \begin{bmatrix}a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12}\\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22}\\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12}\\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22}\end{bmatrix}\end{array}. \tag{12.1.6}$$

$\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}$ 的矩阵元的行与列均用两个指标表示：

$$(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})_{ij,kl}=a_{ik}b_{jl}. \tag{12.1.7}$$

$\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}$ 的各个元素都是 $\boldsymbol{A}$ 的元素在前,$\boldsymbol{B}$ 的元素在后,$\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}$ 与 $\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{A}$ 的差别形成了对易关系.

以下讨论一种特定形式的 $\boldsymbol{L}(u)$：

$$\boldsymbol{L}(u)=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}+u^{-1}\begin{bmatrix}a & b\\ c & d\end{bmatrix}, \tag{12.1.8}$$

其中 u 称为谱参数,下面计算 $\boldsymbol{L}(u)\otimes\boldsymbol{L}(v)$ 与 $\boldsymbol{L}(v)\otimes\boldsymbol{L}(u)$：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L}(u)\otimes\boldsymbol{L}(v)&=\left(\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}+u^{-1}\begin{bmatrix}a & b\\ c & d\end{bmatrix}\right)\otimes\left(\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}+v^{-1}\begin{bmatrix}a & b\\ c & d\end{bmatrix}\right)\\ &=\begin{bmatrix}1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1\end{bmatrix}+u^{-1}\begin{bmatrix}a & 0 & b & 0\\ 0 & a & 0 & b\\ c & 0 & d & 0\\ 0 & c & 0 & d\end{bmatrix}+v^{-1}\begin{bmatrix}a & b & 0 & 0\\ c & d & 0 & 0\\ 0 & 0 & a & b\\ 0 & 0 & c & d\end{bmatrix}\\ &\quad+u^{-1}v^{-1}\begin{bmatrix}a^2 & ab & ba & b^2\\ ac & ad & bc & bd\\ ca & cb & da & db\\ c^2 & cd & dc & d^2\end{bmatrix},\end{aligned} \tag{12.1.9}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L}(v)\otimes\boldsymbol{L}(u)&=\begin{bmatrix}1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1\end{bmatrix}+v^{-1}\begin{bmatrix}a & 0 & b & 0\\ 0 & a & 0 & b\\ c & 0 & d & 0\\ 0 & c & 0 & d\end{bmatrix}+u^{-1}\begin{bmatrix}a & b & 0 & 0\\ c & d & 0 & 0\\ 0 & 0 & a & b\\ 0 & 0 & c & d\end{bmatrix}\\ &\quad+v^{-1}u^{-1}\begin{bmatrix}a^2 & ab & ba & b^2\\ ac & ad & bc & bd\\ ca & cb & da & db\\ c^2 & cd & dc & d^2\end{bmatrix}.\end{aligned} \tag{12.1.10}$$

由于谱参数的存在，它们显示了区别. 但因 $\boldsymbol{L}$ 除谱参数外的矩阵组成是确定的，在以上二式中位置相同的矩阵元其算符的次序仍是一样的. 为了使算符能以不同的次序出现，需引入置换矩阵

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}. \tag{12.1.11}$$

容易验证，将 $\boldsymbol{P}$ 自左方作用于 4×4 矩阵上，能使第 2 行与第 3 行对调. 将 $\boldsymbol{P}$ 从右方作用时，能使第 2 列与第 3 列对调. 定义一个 c 数矩阵 $\check{\boldsymbol{R}}$，

$$\check{\boldsymbol{R}}(u-v)=\boldsymbol{I}+(u-v)\boldsymbol{P}, \tag{12.1.12}$$

其中 $\boldsymbol{I}$ 是单位矩阵. 将 $\check{\boldsymbol{R}}$ 从左方和右方分别作用于式(12.1.9)和式(12.1.10)将会在许多矩阵元的相应位置上产生不同的算符次序，令结果相等则能产生出对易关系. 演示如下：

$$\begin{aligned}
&\check{\boldsymbol{R}}(u-v)(\boldsymbol{L}(u)\otimes\boldsymbol{L}(v))\\
&=\boldsymbol{I}+u^{-1}\begin{bmatrix}a&0&b&0\\0&a&0&b\\c&0&d&0\\0&c&0&d\end{bmatrix}+v^{-1}\begin{bmatrix}a&b&0&0\\c&d&0&0\\0&0&a&b\\0&0&c&d\end{bmatrix}\\
&\quad+u^{-1}v^{-1}\begin{bmatrix}a^2&ab&ba&b^2\\ac&ad&bc&bd\\cd&cb&da&db\\c^2&cd&dc&d^2\end{bmatrix}+(u-v)\left(\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}+u^{-1}\begin{bmatrix}a&0&b&0\\c&0&d&0\\0&a&0&b\\0&c&0&d\end{bmatrix}\right.\\
&\quad\left.+v^{-1}\begin{bmatrix}a&b&0&0\\0&0&a&b\\c&d&0&0\\0&0&c&d\end{bmatrix}+u^{-1}v^{-1}\begin{bmatrix}a^2&ab&ba&b^2\\ca&cb&da&db\\ac&ad&bc&bd\\c^2&cd&dc&d^2\end{bmatrix}\right),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&(\boldsymbol{L}(v)\otimes\boldsymbol{L}(u))\,\check{\boldsymbol{R}}(u-v)=\boldsymbol{I}+v^{-1}\begin{bmatrix}a&0&b&0\\0&a&0&b\\c&0&d&0\\0&c&0&d\end{bmatrix}+u^{-1}\begin{bmatrix}a&b&0&0\\c&d&0&0\\0&0&a&b\\0&0&c&d\end{bmatrix}\\
&\quad+u^{-1}v^{-1}\begin{bmatrix}a^2&ab&ba&b^2\\ac&ad&bc&bd\\cd&cb&da&db\\c^2&cd&dc&d^2\end{bmatrix}+(u-v)\left(\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}+v^{-1}\begin{bmatrix}a&b&0&0\\0&0&a&b\\c&d&0&0\\0&0&c&d\end{bmatrix}+u^{-1}\begin{bmatrix}a&0&b&0\\c&0&d&0\\0&a&0&b\\0&c&0&d\end{bmatrix}+u^{-1}v^{-1}\begin{bmatrix}a^2&ba&ab&b^2\\ac&bc&ad&bd\\ca&da&cb&db\\c^2&dc&cd&d^2\end{bmatrix}\right).
\end{aligned}$$

令二者相等：

$$\check{\boldsymbol{R}}(u-v)\boldsymbol{L}(u)\otimes\boldsymbol{L}(v)=\boldsymbol{L}(v)\otimes\boldsymbol{L}(u)\,\check{\boldsymbol{R}}(u-v), \tag{12.1.13}$$

则容易验证有以下结果：

$$(v^{-1}-u^{-1})\begin{bmatrix} 0 & [a,b]+b & [b,a]-b & 0 \\ [c,a]+c & [c,b]+d-a & [d,a] & [d,b]-b \\ [a,c]-c & [a,d] & [b,c]-d+a & [b,d]+b \\ 0 & [c,d]-c & [d,c]+c & 0 \end{bmatrix}=0. \tag{12.1.14}$$

$\check{\boldsymbol{R}}$中谱参数设置为$u-v$,使得式(12.1.13)左右双方各自有8个矩阵,除最后一个以外,其他7个之和正好对消,而最后一个矩阵的相等便给出式(12.1.14). 从式(12.1.14)便得到以下对易关系:

$$\left.\begin{aligned} &[a,b]=-b, \quad [a,d]=0, \\ &[a,c]=c, \quad\ \ [b,d]=-b, \\ &[c,b]=a-d, [c,d]=c. \end{aligned}\right\}, \tag{12.1.15}$$

式(12.1.18)中的$\boldsymbol{L}(u)$是一种选择. 如果将它改为

$$\boldsymbol{L}(u)=\begin{bmatrix}1 & 0 \\ 0 & \lambda\end{bmatrix}+u^{-1}\begin{bmatrix}a & b \\ c & d\end{bmatrix}, \tag{12.1.16}$$

则得到以下对易关系:

$$\left.\begin{aligned} &[a,b]=-b, \qquad [a,d]=0, \\ &[a,c]=c, \qquad\ \ [b,d]=-\lambda b, \\ &[c,b]=\lambda a-d, \quad [c,d]=\lambda c. \end{aligned}\right\}. \tag{12.1.17}$$

量子力学中的算符都可以用来实现这些关系. 在式(12.1.16)中令$\lambda=0, d=0$,则对易关系式(12.1.17)变为

$$[a,c]=c; \quad [a,b]=-b; \quad [c,b]=0. \tag{12.1.18}$$

容易验证,

$$a=\frac{\partial}{\partial q}, \quad c=\mathrm{e}^{q}, \quad b=\mathrm{e}^{-q} \tag{12.1.19}$$

或

$$a=\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial q}, \quad c=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q}, \quad b=\mathrm{e}^{\mathrm{i}q} \tag{12.1.20}$$

都是式(12.1.18)的实现,只要q,p满足正则对易关系$[q,p]=\mathrm{i}$. 如令式(12.1.16)中$\lambda=1$(即回到式(12.1.8)),并选择

$$a=-L_3, \quad b=L_+, \quad c=L_-, \quad d=L_3 \tag{12.1.21}$$

或

$$a=L_3, \quad b=L_-, \quad c=L_+, \quad d=-L_3, \tag{12.1.22}$$

则式(12.1.15)变为

$$\begin{aligned} &[L_3,L_\pm]=\pm L_\pm, \\ &[L_+,L_-]=2L_3. \end{aligned} \tag{12.1.23}$$

在建立对易关系的普遍框架中,置换矩阵起了重要作用. 今后会看到,在处理相互作用全同粒子体系中,矩阵$\check{\boldsymbol{R}}(u)$会有重要作用. 下面着重讨论一下置换矩阵. 置换矩阵式(12.1.11)

可以用 Pauli 矩阵的直积表示出来，它是

$$P=\frac{1}{2}(I+\boldsymbol{\sigma}\otimes\boldsymbol{\sigma});\tag{12.1.24}$$

其中

$$\boldsymbol{\sigma}\otimes\boldsymbol{\sigma}=\boldsymbol{\sigma}^1\otimes\boldsymbol{\sigma}^1+\boldsymbol{\sigma}^2\otimes\boldsymbol{\sigma}^2+\boldsymbol{\sigma}^3\otimes\boldsymbol{\sigma}^3.\tag{12.1.25}$$

注意，Pauli 矩阵的直积是

$$\boldsymbol{\sigma}^1\otimes\boldsymbol{\sigma}^1=\begin{bmatrix} & & & 1\\ & & 1 & \\ & 1 & & \\ 1 & & & \end{bmatrix},\boldsymbol{\sigma}^2\otimes\boldsymbol{\sigma}^2=\begin{bmatrix} & & & -1\\ & & 1 & \\ & 1 & & \\ -1 & & & \end{bmatrix},\boldsymbol{\sigma}^3\otimes\boldsymbol{\sigma}^3=\begin{bmatrix}1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & 1\end{bmatrix}.$$

其中空白处的矩阵元为 0，则

$$P=\begin{bmatrix}1 & & & \\ & 0 & 1 & \\ & 1 & 0 & \\ & & & 1\end{bmatrix}.\tag{12.1.26}$$

在式(12.1.24)中直积是代表不同空间算符的积. 例如两个自旋 1/2 粒子的体系，两个自旋算符作用于两个不同的空间. 如果标明粒子自旋的 Pauli 算符为 $\boldsymbol{\sigma}_1$ 与 $\boldsymbol{\sigma}_2$，体系的状态用 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 等表示，则式(12.1.24)便是量子力学中的置换算符

$$P=\frac{1}{2}(I+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2).$$

为了演示 P 在自旋状态上的作用，将 P 改写为

$$P=\frac{1}{2}\left[I+\frac{1}{2}(\sigma_1^+\sigma_2^-+\sigma_1^-\sigma_2^+)+\sigma_1^3\sigma_2^3\right].\tag{12.1.27}$$

很容易验证，

$$\begin{aligned}&P|\uparrow\uparrow\rangle=|\uparrow\uparrow\rangle,\\&P\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle+|\uparrow\downarrow\rangle),\\&P|\downarrow\downarrow\rangle=|\downarrow\downarrow\rangle,\\&P\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle-|\uparrow\downarrow\rangle).\end{aligned}$$

置换算符恰好对两个粒子进行置换，它作用于三重态波函数(对称)时给出 1，作用于单态波函数(反对称)给出 −1. 置换算符(矩阵)有一个重要性质，即

$$P^2=1,\tag{12.1.28}$$

两次置换相当于全同变换.

再回到式(12.1.13). $L(u)$ 的辅助空间属 $SL(2)$，与自旋 1/2 矩阵表示相联系. $L(u)\otimes L(v)$ 涉及两个自旋空间，包含了 P 矩阵的 $\check{R}(u-v)$ 对两个空间进行置换. 为了进一步讨论式(12.1.13)，将它写作矩阵元形式：

$$\check{R}(u-v)_{ij,mn}(L(u)\otimes L(v))_{mn,kl}=(L(v)\otimes L(u))_{ij,mn}\check{R}(u-v)_{mn,kl}.\tag{12.1.29}$$

矩阵元指标取值定为+,−,则 2×2 矩阵 $\boldsymbol{L}$ 写作

$$\boldsymbol{L}=\begin{bmatrix}L_{++} & L_{+-}\\ L_{-+} & L_{--}\end{bmatrix}.$$

利用式(12.1.7)将直积的矩阵元用 $\boldsymbol{L}$ 的矩阵元表示,有

$$\check{R}(u-v)_{ij,mn}L(u)_{mk}L(v)_{nl}=L(v)_{im}L(u)_{jn}\check{R}(u-v)_{mn,kl}\qquad(12.1.30)$$

引入新的矩阵 $\boldsymbol{R}(u)$:

$$R(u)_{ij,mn}=\check{R}(u)_{ji,mn},\qquad(12.1.31)$$

式(12.1.30)可以写作三个 4×4 矩阵的乘积:

$$\boldsymbol{R}(u-v)\overset{1}{\boldsymbol{L}}(u)\overset{2}{\boldsymbol{L}}(v)=\overset{2}{\boldsymbol{L}}(v)\overset{1}{\boldsymbol{L}}(u)\boldsymbol{R}(u-v),\qquad(12.1.32)$$

其中

$$\overset{1}{\boldsymbol{L}}(u)=\boldsymbol{L}(u)\otimes\boldsymbol{I},$$

$$\overset{2}{\boldsymbol{L}}(u)=\boldsymbol{I}\otimes\boldsymbol{L}(u),$$

$\boldsymbol{I}$ 是 2×2 单位矩阵. 式(12.1.32)的证明如下. 将它用矩阵元形式写出:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}(u-v)\overset{1}{\boldsymbol{L}}(u)\overset{2}{\boldsymbol{L}}(v)&=R(u-v)_{ij,mn}(\boldsymbol{L}(u)\otimes\boldsymbol{I})_{mn,st}(\boldsymbol{I}\otimes\boldsymbol{L}(v))_{st,kl}\\&=R(u-v)_{ij,mn}L(u)_{ms}\delta_{nt}\delta_{sk}L(v)_{tl}\\&=R(u-v)_{ij,mn}L(u)_{mk}L(v)_{nl}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\overset{2}{\boldsymbol{L}}(v)\overset{1}{\boldsymbol{L}}(u)\boldsymbol{R}(u-v)&=(\boldsymbol{I}\otimes\boldsymbol{L}(v))_{ij,mn}(\boldsymbol{L}(u)\otimes\boldsymbol{I})_{mn,st}R(u-v)_{st,kl}\\&=\delta_{im}L(v)_{jn}L(u)_{ms}\delta_{nt}R(u-v)_{st,kl}\\&=L(v)_{jn}L(u)_{is}R(u-v)_{sn,kl}\end{aligned}$$

将以上自由指标 i 与 j 对换,右端求和指标(n,s)换为(m,n),即为

$$R(u-v)_{ji,mn}L(u)_{mk}L(v)_{nl}=L(v)_{im}L(u)_{jn}R(u-v)_{mn,kl}.\qquad(12.1.33)$$

将它和式(12.1.30)比较,就看到式(12.1.31)中$\check{\boldsymbol{R}}$与 $\boldsymbol{R}$ 的关系. 将$\check{\boldsymbol{R}}$的矩阵形式写出:

$$\check{\boldsymbol{R}}=\boldsymbol{I}+u\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&&1\end{bmatrix}+u\begin{bmatrix}1&&&\\&&1&\\&1&&\\&&&1\end{bmatrix}.$$

将此矩阵的矩阵元$(ij;\,kl)$与$(ji;\,kl)$对换,就是 $\boldsymbol{R}$. 实际上这只涉及第二行及第三行对换,其第一行的元素是$(++;\,kl)$,第二行的元素是$(+-;\,kl)$,第三行的元素是$(-+;\,kl)$,第四行的元素是$(--;\,kl)$. 故有

$$\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix}1&&&\\&&1&\\&1&&\\&&&1\end{bmatrix}+u\begin{bmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&&1\end{bmatrix}=\boldsymbol{P}+u\boldsymbol{I},\qquad(12.1.34)$$

亦即

$$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{P}\check{\boldsymbol{R}},\check{\boldsymbol{R}}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{R}.\qquad(12.1.35)$$

从 $\boldsymbol{R}$ 和$\check{\boldsymbol{R}}$的不为 0 的元素看,它们是(以$\check{\boldsymbol{R}}$为例): $\check{R}_{ij,kl}=\check{R}_{++,++}$, $\check{R}_{+-,+-}$, $\check{R}_{+-,-+}$,

$\check{R}_{-+,+-}$，$\check{R}_{-+,-+}$，$\check{R}_{--,--}$.

共同特点是 $i+j=k+l$，以后会看到它反映了自旋守恒.

如果 $\boldsymbol{P}$ 交换的对象是多个自旋(或多个粒子)中的两个，就需要标出它们的标号，例如 P_{12} 表示粒子 1 与 2 的交换. 置换算符的重要性质是

$$P_{12}P_{13}P_{23} = P_{23}P_{13}P_{12}. \tag{12.1.36}$$

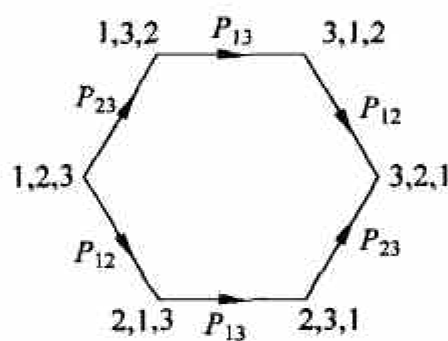


图 12.1 式(12.1.36)的说明

它以图 12.1 表明. 粒子(1,2,3)先经 P_{23}，再经 P_{13}，再经 P_{12} 达到(3,2,1). 它们也可先经 P_{12}，再经 P_{13}，再经 P_{23} 达到同样状态. 同样还可以证明

$$P_{23}P_{12}(1,2,3) = P_{23}(2,1,3) = (3,1,2),$$
$$P_{13}P_{23}(1,2,3) = P_{13}(1,3,2) = (3,1,2).$$

故有 $P_{23}P_{12}=P_{13}P_{23}$ 等. 总括结果如下：

$$P_{23}P_{12} = P_{13}P_{23} = P_{12}P_{13}, \tag{12.1.37}$$
$$P_{23}P_{13} = P_{13}P_{12} = P_{12}P_{23}. \tag{12.1.38}$$

由于 $\boldsymbol{R}(u)$ 与 $\boldsymbol{P}$ 有线性关系，$\boldsymbol{R}$ 也应满足类似关系：

$$R(u)_{12}R(u+v)_{13}R(v)_{23} = R(v)_{23}R(u+v)_{13}R(u)_{12}. \tag{12.1.39}$$

直接计算就可以证明.

$$\begin{aligned} R(u)_{12}R(u+v)_{13}R(v)_{23} &= (u+P_{12})[(u+v)+P_{13}](v+P_{23}) \\ &= uv(u+v)+v(u+v)P_{12}+uvP_{13}+u(u+v)P_{23} \\ &\quad +(u+v)P_{12}P_{23}+vP_{12}P_{13}+uP_{13}P_{23}+P_{12}P_{13}P_{23}. \end{aligned}$$

利用式(12.1.38)得以上 u 与 v 线性项 $vP_{12}P_{13}+uP_{13}P_{23}=(u+v)P_{12}P_{13}$. 再考虑到式(12.1.36)，结果和式(12.1.39)的右端相同. $R(u)$是置换算符的推广. 作用在自旋空间它与 $\boldsymbol{P}$ 满足类似的关系，只是在不同空间有了不同的谱参数，并且$[\boldsymbol{R}(u)]^2\neq\boldsymbol{I}$. 以后可以看到，谱参数具有动量的意义，因此 $\boldsymbol{R}(u)$的解具有动力学内容. 以上我们从一个简单的 $\boldsymbol{R}(u)$形式式(12.1.34)推出了方程(12.1.39). 方程(12.1.39)有多种形式的解，式(12.1.34)是最简单的形式. 实际上方程(12.1.39)具有非常普遍的意义，它就是杨振宁-Baxter 方程[2,3,4,5].

12.2 RTT 关系

上一节讨论的 $\boldsymbol{L}(u)$辅助空间是 2×2 矩阵，从而$\check{\boldsymbol{R}}(u)$矩阵是 4×4 矩阵. 实际上辅助空间可以是任意维的，例如 $\boldsymbol{L}(u)$是 $M\times M$ 矩阵. 相应地$\check{\boldsymbol{R}}$即是 $M^2\times M^2$ 矩阵. 在显示矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的置换作用的式(12.1.32)中，$\overset{1}{\boldsymbol{L}}(u)$与$\overset{2}{\boldsymbol{L}}(v)$分属不同的空间，而 $\boldsymbol{R}(u-v)$作用于两个空间上.

在物理问题中会出现具有许多格点的体系. 每个格点上的力学量(算符)满足通常的对易关系，但不同格点上的力学量彼此对易. 矩阵 $\boldsymbol{L}(u)$可以在各格点上定义，例如在格点 j 上的矩阵是 $\boldsymbol{L}_j(u)$，它的矩阵元是 j 格点上的算符. 不同格点上的算符对易，因此

$$[L_j^{ab}(u), L_k^{cd}(v)] = 0, \quad j\neq k, \tag{12.2.1}$$

a,b 与 c,d 是 $\boldsymbol{L}$ 辅助空间的矩阵元指标，作为矩阵，$\boldsymbol{L}_j(u)$与 $\boldsymbol{L}_k(v)$一般是不对易的. 对 N 格

点体系$\boldsymbol{L}(u)$推广为$\boldsymbol{T}(u)$：

$$\boldsymbol{T}(u)=\boldsymbol{L}_N(u)\boldsymbol{L}_{N-1}(u)\cdots\boldsymbol{L}_2(u)\boldsymbol{L}_1(u)\equiv\prod_{j=1}^{\overleftarrow{N}}\boldsymbol{L}_j(u),\tag{12.2.2}$$

记号上的箭头表示$\boldsymbol{L}$矩阵的次序．$\boldsymbol{T}(u)$称为整体转移矩阵．式(12.1.32)给出的$\boldsymbol{R}(u-v)\overset{1}{\boldsymbol{L}}(u)\overset{2}{\boldsymbol{L}}(v)=\overset{2}{\boldsymbol{L}}(v)\overset{1}{\boldsymbol{L}}(u)\boldsymbol{R}(u-v)$关系推广为

$$R(u-v)_{ij,mn}T(u)_{mk}T(v)_{nl}=T(v)_{jm}T(u)_{in}R(u-v)_{nm,kl},\tag{12.2.3}$$

其矩阵形式是

$$\boldsymbol{R}(u-v)\overset{1}{\boldsymbol{T}}(u)\overset{2}{\boldsymbol{T}}(v)=\overset{2}{\boldsymbol{T}}(v)\overset{1}{\boldsymbol{T}}(u)\boldsymbol{R}(u-v).\tag{12.2.4}$$

对式(12.2.3)的证明，可以先证$N=2$的情况：$\boldsymbol{T}(u)=\boldsymbol{L}_2(u)\boldsymbol{L}_1(u)$．式(12.2.3)左方为

$$R(u-v)_{ij,mn}L_2(u)_{ms}L_1(u)_{sk}L_2(v)_{nr}L_1(v)_{rl}.$$

利用不同格点算符对易将$\boldsymbol{L}_2$与$\boldsymbol{L}_1$各自的矩阵元颠倒次序，然后利用式(12.1.33)将$\boldsymbol{RLL}$写为$\boldsymbol{LLR}$，左方即为

$$\begin{aligned}&L_2(v)_{jm}L_2(u)_{in}R(u-v)_{nm,sr}L_1(u)_{sk}L_1(v)_{rl}\\=&L_2(v)_{jm}L_2(u)_{in}L_1(v)_{mr}L_1(u)_{ns}R(u-v)_{sr,kl}\\=&L_2(v)_{jm}L_1(v)_{mr}L_2(u)_{in}L_1(u)_{ns}R(u-v)_{sr,kl}\\=&T(v)_{jm}T(u)_{in}R(u-v)_{nm,kl},\end{aligned}$$

正是式(12.2.3)的右方．证明$N=2$的情况下式(12.2.2)满足式(12.2.3)后，将$\boldsymbol{T}(u)$再乘上另一格点的$\boldsymbol{L}(u)$矩阵，用同样办法可以证明$N=3$的情况正确，依此类推，可证一般情况正确．式(12.2.3)称RTT关系．和式(12.1.30)相比，只是将$\boldsymbol{L}$换为$\boldsymbol{T}$，$\boldsymbol{L}$表征一个格点处的局域关系，而RTT关系表征整体关系．RTT关系是杨-Baxter系统理论中的基本关系式，也是联系物理学中模型的出发点．

给定$\boldsymbol{R}(u)$，求解RTT关系是指寻找满足RTT关系的$\boldsymbol{T}$矩阵的矩阵元，它们可用量子理论中基本算符表示出来．上一节的简单例子中，式(12.1.8)$\boldsymbol{L}(u)$矩阵的实现式(12.1.21)是

$$\boldsymbol{L}(u)=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}+u^{-1}\begin{bmatrix}L_3&L_-\\L_+&-L_3\end{bmatrix},\tag{12.2.5}$$

它满足最简单的$\boldsymbol{R}$矩阵$\boldsymbol{R}(u)=u\boldsymbol{I}+\boldsymbol{P}$所确定的RTT关系．将$\boldsymbol{L}$改写为$\boldsymbol{S}$：

$$\boldsymbol{S}_\pm=\frac{1}{2}(\boldsymbol{L}_1\pm\mathrm{i}\boldsymbol{L}_2),$$

则用Pauli矩阵$\boldsymbol{\sigma}$可将$\boldsymbol{L}(u)$写作

$$\boldsymbol{L}(u)=\boldsymbol{I}+u^{-1}\boldsymbol{S}\boldsymbol{\sigma},\tag{12.2.6}$$

$\boldsymbol{S}$是Hilbert空间的算符，而$\boldsymbol{\sigma}$是辅助空间的矩阵．将量子力学算符$\boldsymbol{S}$以及相应的$\boldsymbol{L}(u)$定义在各格点上，则有

$$\boldsymbol{L}_j(u)=\boldsymbol{I}+u^{-1}\boldsymbol{S}_j\boldsymbol{\sigma},\tag{12.2.7}$$

$\boldsymbol{S}_j$的对易关系是

$$[S_j^\alpha,S_k^\beta]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}S_j^\gamma\delta_{jk}.\tag{12.2.8}$$

$\boldsymbol{L}_j(u)$称局域转移矩阵．整体转移矩阵是

$$\boldsymbol{T}(u)=(\boldsymbol{I}+u^{-1}\boldsymbol{S}_N\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{I}+u^{-1}\boldsymbol{S}_{N-1}\boldsymbol{\sigma})\cdots(\boldsymbol{I}+u^{-1}\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{\sigma}).\tag{12.2.9}$$

利用

$$\sigma_\alpha \sigma_\beta = \delta_{\alpha\beta} + \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma$$

可将 $\boldsymbol{T}(u)$ 展开，得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{T}(u) &= \boldsymbol{I} + u^{-1}\Big(\sum_{j=1}^{N}\boldsymbol{S}_j\Big)\boldsymbol{\sigma} + u^{-2}\Big\{\mathrm{i}\sum_{j,k,j\neq k}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}S_j^\alpha S_k^\beta\sigma_\gamma + \sum_{j,k,j>k}\boldsymbol{S}_j\boldsymbol{S}_k\Big\} + \cdots \\ &= \boldsymbol{I} + u^{-1}\boldsymbol{S}\boldsymbol{\sigma} + u^{-2}\mathrm{i}\sum_{j,k,j\neq k}\boldsymbol{S}_j \times \boldsymbol{S}_k\boldsymbol{\sigma} + u^{-2}\sum_{j,k,j>k}\boldsymbol{S}_j\boldsymbol{S}_k + \cdots,\end{aligned} \tag{12.2.10}$$

其中 $\boldsymbol{S} = \sum_j^N \boldsymbol{S}_j$ 为总自旋.

以上是从局域转移矩阵 $\boldsymbol{L}(u)$ 出发，构造整体转移矩阵 $\boldsymbol{T}(u)$，并证明了 RTT 关系式(12.2.4)成立. 但一般 RTT 关系(式(12.2.4))的解，却不一定总能分解为局域转移矩阵的乘积.

整体转移矩阵式(12.2.9)可以展为 u^{-1} 的无穷级数式(12.2.10)，也可能是 u^{-1} 的有限阶级数，核心是当给定 $\boldsymbol{R}$ 矩阵时，能解出 $\boldsymbol{T}(u)$.

RTT 关系是在给定 $\boldsymbol{R}(u)$ 情况下对转移矩阵 $\boldsymbol{T}$ 的限定条件，而 $\boldsymbol{R}(u)$ 的"给定"也是有条件的，它必须是杨振宁-Baxter 方程的解.

12.3 杨振宁-Baxter 方程

上一节从一个简单的 $\boldsymbol{R}(u) = \boldsymbol{P} + u\boldsymbol{I}$ 出发，考虑在不同空间上按一定次序作用以 $\boldsymbol{R}$ 算符，其结果应该自洽，得出杨-Baxter 方程(YBE)(式(12.1.39))，但方程普遍的正确性不应依赖具体的 $\boldsymbol{R}(u)$. 由于要考虑多个空间，将 RTT 关系式(12.2.4)略作改变，写为

$$R_{12}(u_1 - u_2)\overset{1}{\boldsymbol{T}}(u_1)\overset{2}{\boldsymbol{T}}(u_2) = \overset{2}{\boldsymbol{T}}(u_2)\overset{1}{\boldsymbol{T}}(u_1)R_{12}(u_1 - u_2). \tag{12.3.1}$$

考虑三个空间的矩阵乘积 $\overset{1}{\boldsymbol{T}}(u_1)\overset{2}{\boldsymbol{T}}(u_2)\overset{3}{\boldsymbol{T}}(u_3)$. 对它们的辅助空间而言，应满足矩阵的结合律：

$$\overset{1}{\boldsymbol{T}}(u_1)(\overset{2}{\boldsymbol{T}}(u_2)\overset{3}{\boldsymbol{T}}(u_3)) = (\overset{1}{\boldsymbol{T}}(u_1)\overset{2}{\boldsymbol{T}}(u_2))\overset{3}{\boldsymbol{T}}(u_3), \tag{12.3.2}$$

这一个普遍的要求导致 $\boldsymbol{R}(u)$ 必然满足 YBE.

由 $R_{12}^{-1}(u_1 - u_2)$(式(12.3.1))$R_{12}^{-1}(u_1 - u_2)$，易得

$$R_{12}^{-1}(u_1 - u_2)\overset{2}{\boldsymbol{T}}(u_2)\overset{1}{\boldsymbol{T}}(u_1) = \overset{1}{\boldsymbol{T}}(u_1)\overset{2}{\boldsymbol{T}}(u_2)R_{12}^{-1}(u_1 - u_2), \tag{12.3.3}$$

并注意 R_{12}，R_{12}^{-1} 只作用在空间 1，2，因而与 $\overset{3}{\boldsymbol{T}}$ 对易，同时用结合律，在诸如 $\overset{1}{\boldsymbol{T}}\overset{2}{\boldsymbol{T}}\overset{3}{\boldsymbol{T}}$ 乘积中不再用括号. 在以下证明中暂时略去 $R_{ij}(u_i - u_j)$ 以及 $\overset{i}{\boldsymbol{T}}(u_i)$ 中的谱参数. 从 $R_{23}R_{13}R_{12}\overset{1}{\boldsymbol{T}}\overset{2}{\boldsymbol{T}}\overset{3}{\boldsymbol{T}}$ 开始，用 RTT 关系，以及 R_{12} 与 $\overset{3}{\boldsymbol{T}}$ 对易，它变为 $R_{23}R_{13}\overset{2}{\boldsymbol{T}}\overset{1}{\boldsymbol{T}}\overset{3}{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{R}_{12}$. 再同样处理前两个因子 R_{23} 和 R_{13}，最后得

$$R_{23}R_{13}R_{12}\overset{1}{T}\overset{2}{T}\overset{3}{\boldsymbol{T}} = \overset{3}{\boldsymbol{T}}\overset{2}{\boldsymbol{T}}\overset{1}{T}R_{23}R_{13}R_{12}. \tag{12.3.4}$$

再用

$$[R_{12}R_{13}R_{23}]^{-1} = R_{23}^{-1}R_{13}^{-1}R_{12}^{-1},$$

将上式左方作用于式(12.3.4)左方，上式右方作用于式(12.3.4)右方，得

$$[R_{12}R_{13}R_{23}]^{-1}R_{23}R_{13}R_{12}\overset{1}{T}\overset{2}{T}\overset{3}{T}=\overset{1}{T}\overset{2}{T}\overset{3}{T}[R_{12}R_{13}R_{23}]^{-1}R_{23}R_{13}R_{12},$$

这正是

$$[(R_{12}R_{13}R_{23})^{-1}R_{23}R_{13}R_{12},\overset{1}{T}\overset{2}{T}\overset{3}{T}]=0.$$

由于$\overset{1}{T}\overset{2}{T}\overset{3}{T}$是三个空间矩阵的乘积，与它对易的只能是常数 c，亦即

$$R_{23}R_{13}R_{12}=cR_{12}R_{13}R_{23}.$$

对三个空间矩阵乘积取行列式，用 $\det \boldsymbol{ABC}=\det \boldsymbol{A}\ \det \boldsymbol{B}\ \det \boldsymbol{C}$，即可确定 $c=1$，因此

$$R_{12}(u_1-u_2)R_{13}(u_1-u_3)R_{23}(u_2-u_3)=R_{23}(u_2-u_3)R_{13}(u_1-u_3)R_{12}(u_1-u_2),\tag{12.3.5}$$

证明完毕. 式(12.3.5)是个较抽象的形式，辅助空间标号 1,2,3 实际上是矩阵元标号演变来的. 和 RTT 关系式(12.2.3)相比，现在的式(12.3.5)应该写作

$$R(u)^{ml}_{ji}R(u+v)^{nt}_{kl}R(v)^{rs}_{mn}=R(v)^{lm}_{kj}R(u+v)^{rn}_{li}R(u)^{st}_{mn}.\tag{12.3.6}$$

式(12.3.6)中已将 u_1-u_2，u_1-u_3，u_2-u_3 分别改写作 u，$u+v$，v，注意到$(u_1-u_2)+(u_2-u_3)=u_1-u_3$，原来矩阵指标 $R_{ji,ml}$ 改为 R^{ml}_{ji}. 式(12.3.6)双方并非三个矩阵的乘积. 若是那样，就应该只有两个自由下指标和两个自由上指标. 式(12.3.6)左右方各有三个自由下指标 i,j,k，三个自由上指标 t,r,s. 其他的 l,m,n 是求和指标，一个上指标与一个下指标求和. 它的来源是，左右双方都是作用于三个 $\boldsymbol{T}$ 矩阵乘积，它有上、下指标各一. 这些指标"消耗"了三个 $\boldsymbol{R}$ 乘积的三个下指标和三个上指标. 式(12.3.6)与式(12.3.5)的关系正如式(12.2.3)与式(12.2.4)的关系. 相应的$\check{R}(u)^{kl}_{ij}=R(u)^{kl}_{ji}$，满足

$$\check{R}(u)^{ml}_{ij}\check{R}(u+v)^{nt}_{lk}\check{R}(v)^{rs}_{mn}=\check{R}(v)^{lm}_{jk}\check{R}(u+v)^{rn}_{il}\check{R}(u)^{st}_{nm}.\tag{12.3.7}$$

用空间标志的关系是

$$\check{R}_{12}(u)\check{R}_{23}(u+v)\check{R}_{12}(v)=\check{R}_{23}(v)\check{R}_{12}(u+v)\check{R}_{23}(u).\tag{12.3.8}$$

为了了解用空间记法与用矩阵指标记法的一致性，可以用图示法，见图 12.2 中 $\check{R}(u)^{lk}_{ij}$表示一个具有内部自由度 i 的粒子与一个具有内部自由度 j 的粒子以相对快度[①] u 发生碰撞，碰撞后的内部自由度分别变为 k 与 l. 如果这个自由度是自旋，则自旋守恒要求 $i+j=k+l$. 图中标出空间Ⅰ与Ⅱ碰撞后末态粒子 l,k 分别处于空间Ⅰ，Ⅱ，线交叉表示碰撞. $\check{\boldsymbol{R}}^{-1}$的表示与$\check{\boldsymbol{R}}$不同之处在于两条粒子空间线的交叉不同. 这是个约定问题. 现在的约定是，在$\check{\boldsymbol{R}}$中末态处于空间Ⅰ的在上，而$\check{\boldsymbol{R}}^{-1}$与它相反. 这是由$\check{\boldsymbol{R}}\check{\boldsymbol{R}}^{-1}=\boldsymbol{I}$决定的. 从图 12.3 看$\check{\boldsymbol{R}}$，$\check{\boldsymbol{R}}^{-1}$两条线，一条总在另一条上面. 因此可以把它们拉开，最后成为两条平行线，根本没有碰撞($\boldsymbol{I}$). 这类图形的性质仅依赖于交叉点的数目以及交叉为上交(overcrossing)或下交(undercrossing)性质. 在不改变交叉数目而将线连续变形，是一种拓扑变换. 上面列举的性质是拓扑性质，而$\check{\boldsymbol{R}}\check{\boldsymbol{R}}^{-1}$或$\check{\boldsymbol{R}}^{-1}\check{\boldsymbol{R}}$与 $\boldsymbol{I}$ 拓扑等价. 注意$\check{\boldsymbol{R}}=\boldsymbol{PR}$.

RTT 关系

$$R(u-v)^{mn}_{ij}T(u)^{k}_{m}T(v)^{l}_{n}=T(v)^{m}_{j}T(u)^{n}_{i}R(u-v)^{kl}_{mn}$$

---

① 在相对论运动学中，质量为 m 的粒子的能量 ϵ、动量 p 之间关系为 $\epsilon^2=p^2+m^2$. 因此可定义快度 u，即 $\epsilon=m\cosh u$，$p=m\sinh u$. 在 $v\ll c$ 时 u 就是速度 v.

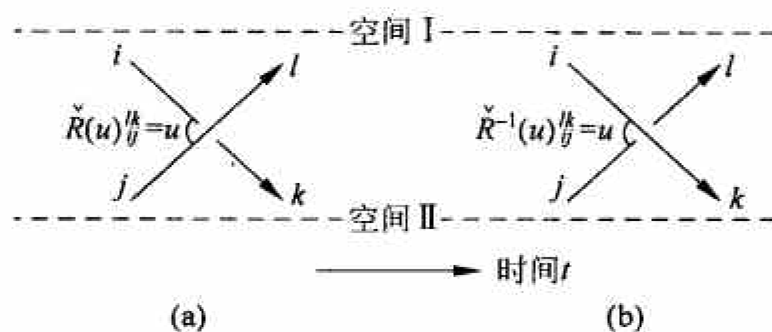


图 12.2　$\check{\boldsymbol{R}}$与$\check{\boldsymbol{R}}^{-1}$的图示

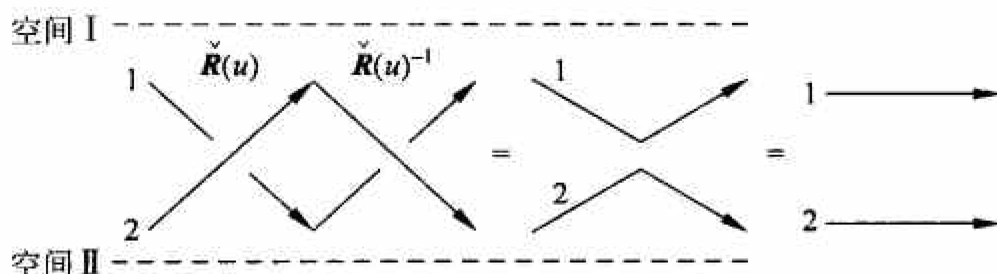


图 12.3　$\check{\boldsymbol{R}}(u)\check{\boldsymbol{R}}^{-1}(u)=\boldsymbol{I}$ 的图示

可用图 12.4 表示. 图中的两个交叉分别代表 $R_{ij}^{mn}(u-v)$ 与 $R_{kl}^{nm}(u-v)$，已在图 12.2 中解释过. 左图中 R_{ij}^{mn} 作用于 T_n^l 与 T_m^k 上，使粒子 1(快度 u)状态由 m 变为 k，粒子 2(快度 v)由 n 变为 l，虚线代表量子空间指标，未标出. m 与 n 是求和指标. 右图的诠释与左图类似. 它们相等的含义是：将左图的虚线连续移动，在不改变图的拓扑性质情况下就成了右图.

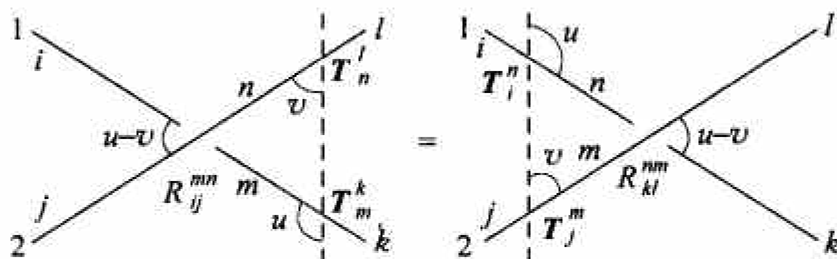


图 12.4　RTT 关系

求解问题的过程是，先解 YBE，得到一种解 $\boldsymbol{R}(u)$. 然后对给定 $\boldsymbol{R}(u)$求解 RTT 关系，即得到 $\boldsymbol{T}(u)$矩阵的各矩阵元作为基本量子力学算符的实现. 这种表示要做到使 $\boldsymbol{T}(u)$作为 u^{-1} 展开到某一阶，满足 RTT 关系，式(12.2.10)给出这种表示的一个例子.

RTT 关系的重要性是它不仅给出对易关系，还给出量子系统的守恒量，包括 Hamilton 量，即规定系统的动力学. RTT 关系是 L. D. Faddeev[1,2] 及其合作者在建立二次量子化反散射方法时提出的. 此后经 V. G. Drinfeld[6,7] 进一步发展成新型对称性理论.

12.4　守恒量集合，Hamilton 量

在力学中，只要知道系统的所有运动积分(即守恒量)，这个系统就称为完全可积的. 在量子理论中，相应的系统称量子可积系统. 在 12.2 节中引入的转移矩阵与守恒量族有密切关系. 用$\check{\boldsymbol{R}}$表示的 RTT 关系是式(12.1.29)：

$$\check{\boldsymbol{R}}(u-v)(\boldsymbol{T}(u)\otimes\boldsymbol{T}(v))=(\boldsymbol{T}(v)\otimes\boldsymbol{T}(u))\check{\boldsymbol{R}}(u-v). \tag{12.4.1}$$

$\check{\boldsymbol{R}}$为非奇异矩阵，存在$\check{\boldsymbol{R}}^{-1}$，故有

$$\boldsymbol{T}(u)\otimes\boldsymbol{T}(v)=\check{\boldsymbol{R}}^{-1}(u-v)(\boldsymbol{T}(v)\otimes\boldsymbol{T}(u))\check{\boldsymbol{R}}(u-v).$$

由于 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})=\mathrm{tr}\boldsymbol{A}\ \mathrm{tr}\boldsymbol{B}$，上式双方取迹，有

$$\mathrm{tr}\boldsymbol{T}(u)\mathrm{tr}\boldsymbol{T}(v)=\mathrm{tr}\boldsymbol{T}(v)\mathrm{tr}\boldsymbol{T}(u),$$

即

$$[\mathrm{tr}\boldsymbol{T}(u),\mathrm{tr}\boldsymbol{T}(v)]=0. \tag{12.4.2}$$

定义

$$\tau(u)=\mathrm{tr}\boldsymbol{T}(u)=\sum_n u^{-n}\tau^{(n)}, \tag{12.4.3}$$

从式(12.4.2)和式(12.4.3)得

$$[\tau^{(n)},\tau^{(m)}]=0. \tag{12.4.4}$$

在式(12.4.3)中未规定 n 求和上下限，这取决于 RTT 关系解 $\boldsymbol{T}(u)$的形式. 有时 $0\leqslant n<\infty$，有时上限是正整数，一般 n 可以对 $-\infty\sim+\infty$区间求和.

以上的讨论表明，知道了 $\boldsymbol{T}(u)$的物理实现，取其矩阵迹再对谱参数展开，就得到系统的所有守恒量 $\tau^{(n)}$，它们彼此对易. 可以选择其中某一个或几个的线性组合作为 Hamilton 量. 这种选择往往以物理意义作为导引，它的经典极限也可以提供参考. 此外，满足 RTT 关系的系统一定是量子可积系统. 虽然在具体实现时并不很简单，但理论构架却是十分确切而简洁的. RTT 关系不仅给出力学量的对易关系，还给出守恒量的完全集合，并且判断出系统的量子可积性.

若将 τ 对 u^{-1}展开至无穷阶，就有无穷多守恒量. 经典一维孤子解有无穷多守恒量，这里粗略说就是它的量子对应. 展开式止于有限阶时，守恒量的个数就是有限的. 它的数目由系统自由度具体地确定.

作展开时可以用 $\mathrm{tr}\boldsymbol{T}(u)$，也可以用 $\ln\mathrm{tr}\boldsymbol{T}(u)$. 对长程相互作用的一维格点模型有特定的方式. 下面讨论近邻作用的 Toda 格子. 在第 n 个格点上的局域转移矩阵是

$$\boldsymbol{L}_n(u)=\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix}+u^{-1}\begin{bmatrix}-p_n&\mathrm{e}^{\mathrm{i}q_n}\\\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q_n}&0\end{bmatrix}. \tag{12.4.5}$$

整体转移矩阵是

$$\begin{aligned}\boldsymbol{T}(u)=&\left\{\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix}+u^{-1}\begin{bmatrix}-p_N&\mathrm{e}^{\mathrm{i}q_N}\\\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q_N}&0\end{bmatrix}\right\}\left\{\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix}+u^{-1}\begin{bmatrix}-p_{N-1}&\mathrm{e}^{\mathrm{i}q_{N-1}}\\\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q_{N-1}}&0\end{bmatrix}\right\}\\&\cdots\left\{\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix}+u^{-1}\begin{bmatrix}-p_1&\mathrm{e}^{\mathrm{i}q_1}\\\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q_1}&0\end{bmatrix}\right\}.\end{aligned} \tag{12.4.6}$$

以下计算 $\boldsymbol{T}(u)$按 u^{-1}展开的低阶幂次，并取迹：

$$\mathrm{tr}\boldsymbol{T}(u)=A_0+u^{-1}A_1+u^{-2}A_2+\cdots, \tag{12.4.7}$$

其中

$$A_0=1,$$

$$A_1=-\sum_{n=1}^{N}p_n,$$

$$A_2 = \sum_{n,m,n>m}^{N} p_n p_m + \sum_{n=1}^{N-1} e^{i(q_{n+1}-q_n)}.$$

其中 A_2 的计算如下：给出 u^{-2} 的两个矩阵可以相邻，也可以不相邻. 对周期边界条件，如果它们相邻，给出的是 $\sum_n p_{n+1}p_n + \sum_n \exp[i(q_{n+1}-q_n)]$；如果它们不相邻，矩阵之间会有 $\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{bmatrix}$，结果是 $\sum_{n,m,n>m} p_n p_m$. 为了得到与经典的对应，先取 ln tr$\boldsymbol{T}(u)$ 再进行展开. 用

$$\ln(1+x) = x - \frac{1}{2}x^2 + \cdots,$$

式(12.4.7)中相应的 x 是

$$x = u^{-1}A_1 + u^{-2}A_2 + \cdots,$$

因此有

$$\begin{aligned}\ln \operatorname{tr}\boldsymbol{T}(u) &= uA_1 + u^{-2}\left(A_2 - \frac{1}{2}A_1^2\right) + \cdots \\ &= uP - u^{-2}H + \cdots.\end{aligned}$$

由于 $-\frac{1}{2}A_1^2 = -\frac{1}{2}\left(\sum_{n=1}^{N} p_n\right)^2 = -\sum_{n,m,n>m}^{N} p_n p_m - \sum_{n=1}^{N} p_n^2$，前项与 A_2 第一项抵消，于是守恒量是

$$\left.\begin{aligned} -P &= -\sum_{n=1}^{N} p_n, \\ +H &= \sum_{n=1}^{N}\left(\frac{1}{2}p_m^2 + e^{i(q_n-q_{n-1})}\right), \\ \cdots \end{aligned}\right\} \tag{12.4.8}$$

其中 P 是总动量，H 是 Toda 格子的 Hamilton 量. 在 H 中格点相互作用只涉及近邻. 若在选局域转移矩阵时不用 $\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{bmatrix}$ 而用 $\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$，便出现长程相互作用.

以上描述的方法可以总结为三个步骤：① 给定 $\boldsymbol{R}(u)$，求出转移矩阵 $\boldsymbol{L}(u)$；② 给 $\boldsymbol{L}(u)$ 赋予格点指标 $\boldsymbol{L}_n(u)$，形成整体转移矩阵 $\boldsymbol{T}(u) = \prod_1^N \boldsymbol{L}_n(u)$；③ 将 tr$\boldsymbol{T}(u)$ 或 ln tr$\boldsymbol{T}(u)$ 展成 u^{-1} 的幂级数，各阶系数就是守恒量. 这个普遍的方法是 Faddeev 等在量子反散射方法中首创的. 在一些特定情况下，可以直接从 $\boldsymbol{R}$ 矩阵求出 Hamilton 量，方法就大大简化了.

矩阵 $\boldsymbol{L}(u)$ 的每个元素都是 Halbert 空间的算符. 若取式(12.1.33)在量子态 a,b 间的矩阵元，结果将是

$$R(u)_{ij}^{mn}(L_{ac}(u+v))_n^t(L_{cb}(v))_m^s = (L_{ac}(v))_j^m(L_{cb}(u+v))_i^n R(u)_{mn}^{ts}. \tag{12.4.9}$$

定义矩阵 $\hat{\boldsymbol{R}}(u)$：

$$\hat{R}(u)_{ij}^{nm} = R(u)_{ij}^{mn}, \tag{12.4.10}$$

它将 $\boldsymbol{R}$ 的两个后指标交换，而 $\check{\boldsymbol{R}}$ 则是将 $\boldsymbol{R}$ 的两个前指标交换. 再定义一个矩阵

$$\widetilde{R}(u)_{na}^{ct} = (L_{ac}(u))_n^t, \tag{12.4.11}$$

它的指标既来自辅助空间矩阵元指标(n,t)，又来自 Hilbert 空间指标(a,c). 式(12.4.9)便

可以写作

$$\hat{R}(u)^{mn}_{ij}\,\widetilde{R}(u+v)^{a}_{na}\,\widetilde{R}(v)^{bs}_{mc} = \widetilde{R}(v)^{cm}_{ja}\,\widetilde{R}(u+v)^{bn}_{ic}\,\hat{R}(u)^{s}_{mn}, \tag{12.4.12}$$

和 YBE(式(12.3.7))相比,发现$\widetilde{\boldsymbol{R}}$满足的方程与$\hat{\boldsymbol{R}}$相同.因此它最简单的解便是

$$\widetilde{\boldsymbol{R}}(u) = \hat{\boldsymbol{R}}(u). \tag{12.4.13}$$

在一个特定情况下,当辅助空间指标 $i,j,k,\cdots$ 与 Hilbert 空间指标取值范围相同时,还可以用$\widetilde{\boldsymbol{R}}$定义整体转移矩阵:

$$\{T^{(N)}(u)^{b}_{a}\}^{i_{N+1}}_{i_1} = (L_{a_1b_1}(u))^{i_2}_{i_1}(L_{a_2b_2}(u))^{i_3}_{i_2}\cdots(L_{a_Nb_N}(u))^{i_{N+1}}_{i_N}, \tag{12.4.14}$$

其中

$$\boldsymbol{a} = (a_1,a_2,\cdots,a_N), \quad \boldsymbol{b} = (b_1,b_2,\cdots,b_N).$$

式(12.4.14)中 Hilbert 空间指标是与格点有关的,格点间没有求和,而辅助空间则是 N 个矩阵相乘,因此有指标求和.用定义式(12.4.11),有

$$\{T^{(N)}(u)^{b}_{a}\}^{i_{N+1}}_{i_1} = \hat{R}(u)^{b_1i_2}_{i_1a_1}\,\hat{R}(u)^{b_2i_3}_{i_2a_2}\cdots\hat{R}(u)^{b_Ni_{N+1}}_{i_Na_N}. \tag{12.4.15}$$

RTT 关系是

$$\hat{\boldsymbol{R}}(u-v)(\boldsymbol{T}^{(N)}(u)^{c}_{a}\otimes\boldsymbol{T}^{(N)}(v)^{b}_{c}) = (\boldsymbol{T}^{(N)}(v)^{c}_{a}\otimes\boldsymbol{T}^{(N)}(u)^{b}_{c})\,\hat{\boldsymbol{R}}(u-v). \tag{12.4.16}$$

由于$\hat{\boldsymbol{R}}$是置换辅助空间指标的,故 Hilbert 空间指标不受影响.关系式(12.4.16)的图示是图 12.4 的扩展,示于图 12.5.图中 a_i 与 b_j 均为自由指标.令一个图的虚线平移越过交叉点,各线保持距交叉点远近次序,便成为另一个(相等的)图.对辅助空间求迹,得

$$(\tau^{(N)}(u))^{b}_{a} \equiv \mathrm{tr}(\boldsymbol{T}^{(N)}(u))^{b}_{a} = \{T^{(N)}(u)^{b}_{a}\}^{i_1}_{i_1}$$

$$= \hat{R}(u)^{b_1i_2}_{i_1a_1}\,\hat{R}(u)^{b_2i_3}_{i_2a_2}\cdots\hat{R}(u)^{b_{N-1}i_N}_{i_{N-1}a_{N-1}}\,\hat{R}(u)^{b_Ni_1}_{i_Na_N}. \tag{12.4.17}$$

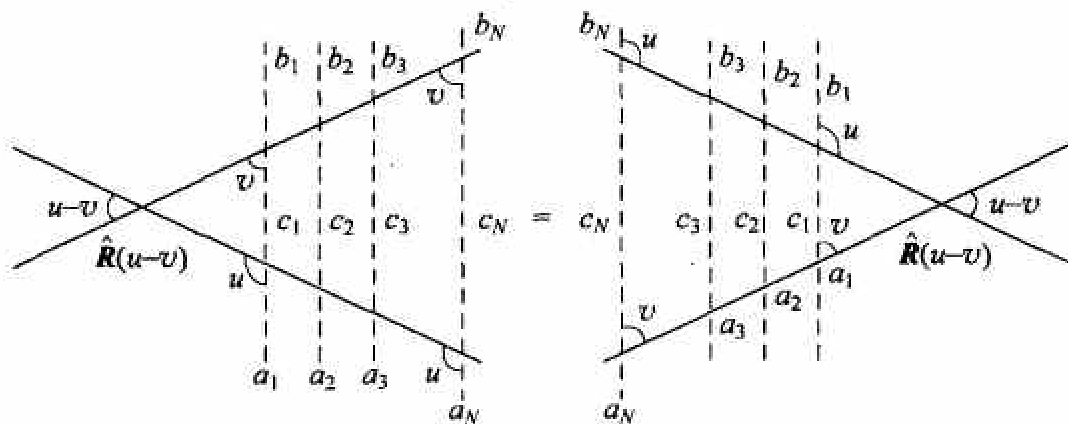


图 12.5　$\hat{\text{R}}$TT 关系图示

在 YBE 解中,原有$\check{\boldsymbol{R}}(u=0)=\boldsymbol{I}$,现要求

$$\hat{\boldsymbol{R}}(u=0) = \boldsymbol{I}, \tag{12.4.18}$$

因$\hat{\boldsymbol{R}}$与$\check{\boldsymbol{R}}$在 YBE 意义下没有差别.当 Hilbert 空间指标与辅助空间取值范围相等时,利用

$$\hat{R}(0)^{b_1i_2}_{i_1a_1} = (\boldsymbol{I}\otimes\boldsymbol{I})^{b_1i_2}_{i_1a_1} = \delta_{i_1b_1}\delta_{a_1i_2},$$

其中$\hat{\boldsymbol{R}}$是 $M^2\times M^2$ 矩阵,$\boldsymbol{I}$ 是 $M\times M$ 单位矩阵,得

$$\{T^{(N)}(u)^{b}_{a}\}^{i_1}_{i_1} = \underbrace{\delta^{b_1}_{i_1}\delta^{i_2}_{a_1}\cdot\delta^{b_2}_{i_2}\delta^{i_3}_{a_2}\cdot\cdots\cdot\delta^{b_N}_{i_N}\delta^{i_1}_{a_N}}_{2N\text{个 Kronecker }\delta} = \underbrace{\delta^{b_1}_{a_N}\delta^{b_2}_{a_1}\delta^{b_3}_{a_2}\cdots\delta^{b_N}_{a_{N-1}}}_{N\text{个 Kronecker }\delta}, \tag{12.4.19}$$

$$(T^{(N)^{-1}}(u)^{b}_{a})^{i_1}_{i_1}\big|_{u=0} = \delta^{b_1}_{a_2}\delta^{b_2}_{a_3}\cdots\delta^{b_{N-1}}_{a_N}\delta^{b_N}_{a_1}. \tag{12.4.20}$$

于是有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}\ln\{\tau^{(N)}(u)\}_a^b\bigg|_{u=0}=\{\tau^{(N)}(u)^{-1}\}_c^b\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}\{\tau^{(N)}(u)\}_a^c\bigg|_{u=0}$$

$$=\sum_{i=1}^{N}\left(\delta_{a_1}^{b_1}\delta_{a_2}^{b_2}\cdots\delta_{a_{i-1}}^{b_{i-1}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}\hat{R}(u)_{a_ia_{i+1}}^{b_ib_{i+1}}\bigg|_{u=0}\delta_{a_{i+2}}^{b_{i+2}}\cdots\delta_{a_N}^{b_N}\right).\quad(12.4.21)$$

用空间直乘形式写出，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}\ln\tau^{(N)}(u)\mid_{u=0}=\sum_{i=1}^{N}\overset{(1)}{I}\otimes\overset{(2)}{I}\otimes\cdots\otimes\overset{(i-1)}{I}\otimes\frac{\mathrm{d}\hat{R}(u)^{(i,i+1)}}{\mathrm{d}u}\bigg|_{u=0}\otimes I^{(i+2)}\otimes\cdots\otimes I^{(N)}.$$

(12.4.22)

式(12.4.22)给出的是 $\ln\tau^{(N)}(u)$ 对 u 展开的一阶系数(算符). 有些模型就是取它为 Hamilton 量. 按这种选择，式(12.4.22)就给出“局域”Hamilton 量[12,8]

$$H_{i,i+1}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}\hat{R}(u)^{(i,i+1)}\mid_{u=0},\quad(12.4.23)$$

而系统的 Hamilton 量是

$$H=\sum_{i=1}^{N}H_{i,i+1}.\quad(12.4.24)$$

由于$\hat{\boldsymbol{R}}(u)$与$\check{\boldsymbol{R}}(u)$都是 YBE 的解，也可以选择

$$H_{i,i+1}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}\check{R}(u)^{(i,i+1)}\mid_{u=0}.\quad(12.4.25)$$

以上的讨论证明了，对一类可积系统，它的量子空间维数与辅助空间维数相同时，例如自旋 1/2 的态空间与辅助空间维数均为 2 时，再选 $\ln\tau(u)$的一阶展开系数为 Hamilton 量，则不必从头按 Faddeev 等创立的步骤执行. 只要选好 YBE 的解，将它局域化，取对 u 的导数，然后设 $u=0$，即得 Hamilton 量.

由于$\check{\boldsymbol{R}}(u)$矩阵是将两个相邻空间进行置换，而最简单的解$\check{\boldsymbol{R}}=\boldsymbol{I}+u\boldsymbol{P}$ 在格点情况下就是

$$\check{R}(u)^{(i,i+1)}=I+uP_{i,i+1}.$$

$\check{\boldsymbol{R}}$的一阶系数就是 $\boldsymbol{p}$，因此

$$H=\sum_{i=1}^{N}H_{i,i+1}=\sum_{i=1}P_{i,i+1}.\quad(12.4.26)$$

置换算符式(12.1.26)仅在自旋 1/2 时可表示为

$$P_{i,i+1}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_{i+1}),$$

即得到

$$H=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_{i+1}).\quad(12.4.27)$$

这是各向同性 Heisenberg 链模型的 Hamilton 量. 在自旋不是 1/2 时，用自旋算符表示 $\boldsymbol{P}_{i,i+1}$就要复杂了. 以上方法大体适用于近邻自旋相互作用的链模型.

最后，对谱参数展开作一点补充. 上面提到过将 $\mathrm{tr}\boldsymbol{T}(u)$对 u^{-1}作展开，在以上简便方法中，是取 u 的一次项. 由于 RTT 关系，如在 $\boldsymbol{R}$ 中选 u 正幂次，$\boldsymbol{T}$ 便依 u 负幂次展开，反过来也一样. 物理中许多问题是和某些解析函数的极点以及在极点处的留数有关的. 因此需要得到 Laurent 级数，这便是以上两种选择的原因. 如果函数到处解析，在物理上便成为平庸了.

本节相关内容可参阅文献[1]，[2]，[8]～[11].

12.5　量子行列式,余乘法

当辅助空间为 $SL(2)$时,转移矩阵 $\boldsymbol{T}(u)$是 2×2 矩阵,但其矩阵元是算符. 对于一个 c 数矩阵,其逆矩阵与矩阵的行列式有关. 因此,需要找出转移矩阵的相应"行列式",它应能和任何矩阵元(算符)对易. 这个"行列式"记为$\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u)$,称为量子行列式:

$$\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u) = T_{11}(u)T_{22}(u-1) - T_{12}(u)T_{21}(u-1), \tag{12.5.1}$$

它满足

$$[\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u), T_{ab}(v)] = 0. \tag{12.5.2}$$

在证明之前,先要导出一个关系,在 RTT 关系

$$\check{\boldsymbol{R}}(u-v)(\boldsymbol{T}(u)\otimes\boldsymbol{T}(v)) = (\boldsymbol{T}(v)\otimes\boldsymbol{T}(u))\check{\boldsymbol{R}}(u-v)$$

中,取

$$\check{\boldsymbol{R}}(u) = \boldsymbol{I} + u\boldsymbol{P},$$

并用置换矩阵 $\boldsymbol{P}$ 的表达式

$$P_{ab}^{cd} = \delta_a^d\delta_b^c, \quad a,b,c,d = 1,2. \tag{12.5.3}$$

RTT 关系给出

$$(u-v)[T_{bc}(u), T_{ad}(v)] + T_{ac}(u)T_{bd}(v) - T_{ac}(v)T_{bd}(u) = 0. \tag{12.5.4}$$

在式(12.5.4)中令 $a=b, c=d$,再考虑到 u 与 v 是任意的,有

$$[T_{ac}(u), T_{ac}(v)] = 0. \tag{12.5.5}$$

为了证明式(12.5.2),先取一个矩阵元 T_{11}为例. 用式(12.5.5),有

$$\begin{aligned}[\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u), T_{11}(v)] = {} & T_{11}(u)[T_{22}(u-1), T_{11}(v)] \\ & - [T_{12}(u), T_{11}(v)]T_{21}(u-1) - T_{12}(u)[T_{21}(u-1), T_{11}(v)].\end{aligned}$$

将式(12.5.4)给出的$[T_{bc}(u-1), T_{ad}(v)] = (u-v-1)^{-1}(T_{ac}(v)T_{bd}(u) - T_{ac}(u)T_{bd}(v))$代入上式,则有

$$\begin{aligned}[\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u), T_{11}(v)] = {} & (u-v-1)^{-1}T_{11}(u)(T_{12}(v)T_{12}(u-1) - T_{12}(u-1)T_{21}(v)) \\ & - (u-v)^{-1}(T_{11}(v)T_{12}(u) - T_{11}(v)T_{12}(u))T_{21}(u-1) \\ & - (u-v-1)^{-1}T_{12}(u)(T_{11}(v)T_{21}(u-1) - T_{11}(u-1)T_{21}(v)) \\ = {} & (u-v-1)^{-1}(u-v)^{-1}\{(u-v)[T_{11}(v), T_{12}(u)] \\ & + T_{11}(u)T_{12}(v) - T_{11}(v)T_{12}(u)\}T_{21}(u-1) \\ = {} & 0.\end{aligned}$$

最后一步是式(12.5.4)中 $b=c=1, a=1, d=2$ 的结果. 类似地可以证明$\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u)$与所有$\boldsymbol{T}(v)$的矩阵元对易,$\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u)$显然也和 $\mathrm{tr}\boldsymbol{T}(v) = T_{11}(v) + T_{22}(v)$对易:

$$[\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u), \mathrm{tr}\boldsymbol{T}(v)] = 0. \tag{12.5.6}$$

$T_{ab}(u)$和$\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u)$都作展开:

$$T_{ab}(u) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} u^{-n}T_{ab}^{(n)}, \tag{12.5.7}$$

$$\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u) = C_0 + \sum_{n=1}^{\infty} u^{-n}C_n. \tag{12.5.8}$$

式(12.5.2)给出

$$[C_n, T_{ab}^{(m)}] = 0, \tag{12.5.9}$$

必有

$$[C_n, \tau^{(m)}] = 0. \tag{12.5.10}$$

$\{C_n\}$构成一族守恒量,

$$[C_n, C_m] = 0, \tag{12.5.11}$$

并与$\{\tau^{(m)}\}$对易. 不同的是,C_n 和 $T_{ab}^{(m)}$ 对易,而 $\tau^{(n)}$ 一般与 $T_{ab}^{(m)}$ 不对易. 注意,守恒族是由彼此对易的集合构成的,原则上并不要求与 $T_{ab}^{(m)}$ 对易. 有些模型的 Hamilton 量是与 C_n 相联系的,有的则与 $\tau^{(m)}$ 相联系.

由于$\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u)$与 T_{ab} 对易,便可引入$(\boldsymbol{T}(u))^{-1}$:

$$(\boldsymbol{T}(u))^{-1} = (\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u))^{-1}\begin{bmatrix} T_{22}(u-1) & -T_{12}(u-1) \\ -T_{21}(u-1) & T_{11}(u-1) \end{bmatrix}. \tag{12.5.12}$$

在定义$\widetilde{\det}$时用了 $u-1$,实际上用 $u-a$(a 为任意常数)是一样的.

Yangian 的另一个要素是余乘法(co-product). 它是一种运算[6,7],用 Δ 表示. 它作用于两个算符之积时满足

$$\Delta(AB) = \Delta(A)\Delta(B), \tag{12.5.13}$$

它作用于转移矩阵的算符元素时定义为

$$\Delta(T_{ab}) = \sum_c T_{ac} \otimes T_{cb} \equiv T_{ac} \otimes T_{cb} \tag{12.5.14}$$

用直积表示算符分属两个独立的量子空间. 当 Bose 算符直积相乘时有

$$(\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})(\boldsymbol{C} \otimes \boldsymbol{D}) = \boldsymbol{AC} \otimes \boldsymbol{BD}, \tag{12.5.15}$$

两个空间分别保持算符次序. 余乘法的定义保证 Δ 运算作用于 $\boldsymbol{T}(u)$元素算符乘积上时,保持 RTT 关系在量子空间的张量空间也成立. 若选择$\check{\boldsymbol{R}} = \boldsymbol{I} + u\boldsymbol{P}$,RTT 的具体形式就是式(12.5.2). 以下证明这个关系在 Δ 作用时是不变的. 考虑将 Δ 作用于$[T_{bc}(u), T_{ad}(v)]$的结果:

$$\begin{aligned}
&\Delta[T_{bc}(u), T_{ad}(v)] \\
&= \Delta[T_{bc}(u)T_{ad}(v) - T_{ad}(v)T_{bc}(u)] \\
&= \Delta(T_{bc}(u))\Delta(T_{ad}(v)) - \Delta(T_{ad}(v))\Delta(T_{bc}(u)) \\
&= (T_{bm}(u) \otimes T_{nc}(u))(T_{am}(v) \otimes T_{md}(v)) - (T_{an}(v) \otimes T_{nd}(v))(T_{bm}(u) \otimes T_{mc}(u)).
\end{aligned}$$

以上用了式(12.5.13),式(12.5.14),重复指标 n 及 m 代表求和. 再用式(12.5.15)有

$$\begin{aligned}
&\Delta[T_{bc}(u), T_{ad}(v)] \\
&= T_{bn}(u)T_{am}(v) \otimes T_{nc}(u)T_{md}(v) \\
&\quad - T_{am}(v)T_{bn}(u) \otimes T_{nc}(u)T_{md}(v) + T_{am}(v)T_{bn}(u) \otimes T_{nc}(u)T_{md}(v) \\
&\quad - T_{am}(v)T_{bn}(u) \otimes T_{md}(v)T_{nc}(u).
\end{aligned}$$

上式右端第二项与第三项是故意加进去的,其和为零,第四项哑标 m 和 n 作了对换. 故有

$$\begin{aligned}
\Delta[T_{bc}(u), T_{ad}(v)] = {} & [T_{bn}(u), T_{am}(v)] \otimes T_{nc}(u)T_{md}(v) \\
& + T_{am}(v)T_{bn}(u) \otimes [T_{nc}(u), T_{md}(v)].
\end{aligned}$$

对上式乘以$(u-v)$,对右方的$(u-v)[,]$都用式(12.5.4),因此有

$$
\begin{aligned}
&(u-v)\Delta[T_{bc}(u),T_{ad}(v)]\\
=&(T_{an}(v)T_{bm}(u)-T_{an}(u)T_{bm}(v))\otimes T_{nc}(u)T_{md}(v)\\
&+T_{am}(v)T_{bn}(u)\otimes(T_{mc}(v)T_{nd}(u)-T_{mc}(u)T_{nd}(v))\\
=&T_{an}(v)T_{bm}(u)\otimes T_{nc}(u)T_{md}(v)-T_{an}(u)T_{bm}(v)\otimes T_{nc}(u)T_{md}(v)\\
&+T_{am}(v)T_{bn}(u)\otimes T_{mc}(v)T_{nd}(u)-T_{am}(v)T_{bn}(u)\otimes T_{mc}(u)T_{nd}(v).
\end{aligned}
$$

将第一项中哑标 n 与 m 对换，发现它和第四项正相抵消，结果是

$$
\begin{aligned}
&(u-v)\Delta[T_{bc}(u),T_{ad}(v)]\\
=&(T_{am}(v)\otimes T_{mc}(v))(T_{bn}(u)\otimes T_{nd}(u))\\
&-(T_{an}(u)\otimes T_{nc}(u))(T_{bm}(v)\otimes T_{md}(v))\\
=&\Delta(T_{ac}(v))\Delta(T_{bd}(u))-\Delta(T_{ac}(u))\Delta(T_{bd}(v))\\
=&\Delta(T_{ac}(v)T_{bd}(u)-T_{ac}(u)T_{bd}(v)).
\end{aligned}
$$

它正是将 Δ 运算作用于式(12.5.4)的结果. 即余乘法保证了 RTT 关系.

上述定义余乘法 Δ 的形式式(12.5.14)有更深一层的含义. 我们知道，RTT 关系给出了量子空间中诸算子(矩阵元 $T_{ab}^{(n)}$)间的对易关系，它们都是在同一个量子空间即"向量"空间中实现的，但是作为完整的运算，必定应存在量子张量空间的定义，它必须满足一定的运算封闭性. 因而余乘法的引入是十分必要的，因为它给出了从量子向量空间向张量空间扩张的规则. 从 RTT 关系角度看，所定义的 Δ 运算(余乘法)必须满足 RTT 关系两端在 Δ 下相等，亦即在量子张量空间的成立，这就是上面证明过程的含义. 严格说，Yangian 由两部分构成，一个是对易关系，另一个是余乘法. 如果从 RTT 关系出发，那么将出现两者的一致性：只要找到满足 RTT 关系的 $T_{ab}(u)$，按式(12.5.14)立即定义了余乘法，一切都是自洽的.

当辅助空间取为 2×2 时，$\boldsymbol{T}(u)$ 的对 u^{-n} 展开的一般形式写为

$$
\boldsymbol{T}(u)=\boldsymbol{I}+\sum_{n=1}^{\infty}u^{-n}\begin{bmatrix}T_{11}^{(n)} & T_{12}^{(n)}\\ T_{21}^{(n)} & T_{22}^{(n)}\end{bmatrix}. \tag{12.5.16}
$$

对 2×2 矩阵很自然引入 $(+,-,3,0)$ 分量：

$$
\left.\begin{aligned}
&T_{+}^{(n)}=T_{12}^{(n)}, && T_{-}^{(n)}=T_{21}^{(n)},\\
&T_{3}^{(n)}=T_{22}^{(n)}-T_{11}^{(n)}, && T_{0}^{(n)}=T_{22}^{(n)}+T_{11}^{(n)}.
\end{aligned}\right\} \tag{12.5.17}
$$

通过它们 $\boldsymbol{T}(u)$ 可以写作

$$
\boldsymbol{T}(u)=\boldsymbol{I}+\sum_{n=1}^{\infty}u^{-n}\begin{bmatrix}\frac{1}{2}(T_{0}^{(n)}-T_{3}^{(n)}) & T_{+}^{(n)}\\ T_{-}^{(n)} & \frac{1}{2}(T_{0}^{(n)}+T_{3}^{(n)})\end{bmatrix}. \tag{12.5.18}
$$

引入

$$
\left.\begin{aligned}
&I_{\pm}=T_{\pm}^{(1)}, && I_{3}=\frac{1}{2}T_{3}^{(1)},\\
&J_{\pm}=T_{\pm}^{(2)}, && J_{3}=\frac{1}{2}T_{3}^{(2)},
\end{aligned}\right\} \tag{12.5.19}
$$

则转移矩阵可表达为

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{T}(u)=&\boldsymbol{I}+u^{-1}\begin{bmatrix}\frac{1}{2}T_{0}^{(1)}-I_{3} & I_{+}\\ I_{-} & \frac{1}{2}T_{0}^{(1)}+I_{3}\end{bmatrix}+u^{-2}\begin{bmatrix}\frac{1}{2}T_{0}^{(2)}-J_{3} & J_{+}\\ J_{-} & \frac{1}{2}T_{0}^{(2)}+J_{3}\end{bmatrix}\\
&+\sum_{n=3}^{\infty}u^{-n}\begin{bmatrix}\frac{1}{2}(T_{0}^{(n)}-T_{3}^{(n)}) & T_{+}^{(n)}\\ T_{-}^{(n)} & \frac{1}{2}(T_{0}^{(n)}+T_{3}^{(n)})\end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{12.5.20}
$$

利用式(12.5.20)的符号标记，容易得到$\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u)$展开式(12.5.8)的各阶系数：

$$\begin{aligned}
C_0 &= 1,\\
C_1 &= T_0^{(1)} = \mathrm{tr}\boldsymbol{T}^{(1)},\\
C_2 &= T_0^{(2)} - \frac{1}{2}(2I_3^2 + I_+ I_- + I_- I_+) + T_0^{(1)}\left(1 + \frac{1}{2}T_0^{(1)}\right)\\
&= T_0^{(2)} - \boldsymbol{I}^2 + T_0^{(1)}\left(1 + \frac{1}{2}T_0^{(1)}\right),\\
&\cdots.
\end{aligned} \tag{12.5.21}$$

在 12.2 节中从$\check{\boldsymbol{R}}=\boldsymbol{I}+u\boldsymbol{P}$ 出发，RTT 方程的解 $\boldsymbol{L}_j(u)=\boldsymbol{I}+u^{-1}\boldsymbol{S}_j\cdot\boldsymbol{\sigma}$ 作为局域转移矩阵构成了整体转移矩阵 $\boldsymbol{T}(u)$，它对 u^{-1}的展开式(12.2.10)是①

$$\boldsymbol{T}(u) = \boldsymbol{I} + u^{-1}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{\sigma} + u^{-2}\mathrm{i}\sum_{i,j,i\neq j}\boldsymbol{s}_i\times\boldsymbol{s}_j\cdot\boldsymbol{\sigma} + u^{-2}\sum_{i,j,i>j}\boldsymbol{s}_i\cdot\boldsymbol{s}_j + \cdots.$$

与一般形式式(12.5.20)比较，有

$$T_0^{(1)} = 0, \quad T_0^{(2)} = \boldsymbol{I}^2, \tag{12.5.22}$$

$$I_\pm = S_\mp, \quad I_3 = -S_3, \tag{12.5.23}$$

$$J_\pm = \mathrm{i}\sum_{i,j,i\neq j}(\boldsymbol{S}_i\times\boldsymbol{S}_j)_\mp, \quad J_3 = -\mathrm{i}\sum_{i,j,i\neq j}(\boldsymbol{S}_i\times\boldsymbol{S}_j)_3. \tag{12.5.24}$$

将式(12.5.22)与式(12.5.21)相比，得到 $C_0=1, C_1=0, C_2=0$. 因此，准到 u^{-2}阶有$\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u)=1$. 对当前的情况可以严格证明$\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u)=1$.

有了以上的讨论，可以给与 $SL(2)$相关的 Yangian 一个简单的定义. 设 $\boldsymbol{R}(u)$满足 YBE 且具有 u 多项式形式，$\boldsymbol{T}(u)$满足 RTT 关系，则 $\boldsymbol{T}(u)$对 u^{-1}的展开式中 u^{-1}与 u^{-2}前的算符系数诸矩阵元组成 Yangian 的生成元，它们的对易关系由 RTT 关系决定，而 RTT 关系是和余乘法相洽的. 对易关系与余乘法是定义 Yangian 的两个要素. 但如从 RTT 关系出发得到$\{I_\alpha\}$(与 u^{-1}相联系)与$\{J_\alpha\}$(与 u^{-2}相联系)的对易关系，则余乘法自然成立. 当$\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u)=1$时，上述 Yangian 是 $Y(SL(2))$，而$\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u)\neq 1$ 时，Yangian 为 $Y(gL(2))$.

Drinfeld 阐明了 Yangian 的重要性质. 如果 $\boldsymbol{R}(u)$是 u 的多项式形式(包括上面讨论的$\check{\boldsymbol{R}}=\boldsymbol{I}+u\boldsymbol{P}$)，则称为 YBE 的有理解. 对有理解，只需知道 I_α 与 J_α 共 6 个生成元，则以后各阶 $T_\alpha^{(n)}$ ($n\geqslant 3$; $\alpha=+,-,3$)元素及其对易关系就都确定了. $T_\alpha^{(n)}$ 组成一组无穷维代数，但这个无穷维代数是由有限个生成元(现为 6 个)决定的. 这一点可以和李群与李代数的关系作一个比较. 李群是由李代数决定的，群元素在原点附近对群参数的一阶微商(李代数生成元)决定了李群行为. 现在 $\boldsymbol{T}(u)$不仅由 $T_\alpha^{(1)}$ 决定，而且还要由 $T_\alpha^{(1)}, T_\alpha^{(2)}$ ($\alpha=+,-,3,0$)决定. YBE 的另一种解是三角解，即对参数 u 具有周期性，将另作讨论.

本节内容可参阅文献[6,7].

此外，作为 $SL(2)$代数的延伸，$Y(SL(2))$的表示论已由 Chari-Pressley 解决，可参阅文献[13].

① $\boldsymbol{s}^2 = (\sum_i \boldsymbol{s}_i)^2$ 与 $\sum_{i,j,i>j}\boldsymbol{s}_i\cdot\boldsymbol{s}_j$ 相差 $\sum_i \boldsymbol{s}_i^2$，为一常数. $T_0^{(n)}$ 是通过对易关系定义的，常数不起作用.

在下面我们研究余乘的具体情况.引入量子直积符号$\otimes$,它是和辅助空间的直积不同的,我们考虑

$$\Delta(T_{mn}(u)) = \sum_k (T_{mk}(u) \otimes T_{kn}(u)), \tag{12.5.25}$$

此处 T_{mn} 是转移矩阵 $\boldsymbol{T}(u)$ 的矩阵元.在上面的例子中,$m,n=a,b=1,2$.
式(12.5.25)对于任何 u 的值都成立,因此我们可以考虑它对于 u^{-1},u^{-2} 的展开,即将展开 $\boldsymbol{T}(u) = \sum_{n=0} u^{-n}\boldsymbol{T}^{(n)}$ 代入上式.在 $\det\boldsymbol{T}(u)=1$ 的情况下(即对于 $Y(SL(2))$),我们有

$$\Delta(T_{ab}(u)) = \sum_{c=1,2} (T_{ac}(u) \otimes T_{cb}(u)), \tag{12.5.26}$$

由于式(12.5.23)和式(12.5.24),$\boldsymbol{I}$ 对应于 u^{-1} 的算符系数,$\boldsymbol{J}$ 对应于 u^{-2} 的算符系数,因此只展开到 u^{-1} 和 u^{-2} 就足够了:

$$\Delta(T_{ab}^{(0)}) = \sum_c (T_{ac}^{(0)} \otimes T_{cb}^{(0)}), \tag{12.5.27a}$$

$$\Delta(T_{ab}^{(1)}) = \sum_c (T_{ac}^{(1)} \otimes T_{cb}^{(0)} + T_{ac}^{(0)} \otimes T_{cb}^{(1)}), \tag{12.5.27b}$$

$$\Delta(T_{ab}^{(2)}) = \sum_c (T_{ac}^{(2)} \otimes T_{cb}^{(0)} + T_{ac}^{(0)} \otimes T_{cb}^{(2)} + T_{ac}^{(1)} \otimes T_{cb}^{(1)}) \tag{12.5.27c}$$

式(12.5.27a)给出 $\Delta(1)=1\otimes 1$,如我们所料.式(12.5.27b)和式(12.5.27c)的另外两式变为

$$\Delta(T_{ab}^{(1)}) = T_{ab}^{(1)} \otimes 1 + 1 \otimes T_{ab}^{(1)}, \tag{12.5.28}$$

$$\Delta(T_{ab}^{(2)}) = T_{ac}^{(2)} \otimes 1 + 1 \otimes T_{ac}^{(2)} + \sum_c (T_{ab}^{(1)} \otimes T_{cb}^{(1)}).$$

考虑到 $T_0^{(n)} = T_{11}^{(n)} + T_{22}^{(n)}$,$T_3^{(n)} = T_{22}^{(n)} - T_{11}^{(n)}$,并将

$$T_{\pm}^{(1)} = I_{\pm},$$

$$T_{22}^{(1)} = - T_{11}^{(1)} = I_3,$$

$$T_{\pm}^{(2)} = (-2h)J_{\pm},\ T_3^{(2)} = \left(-\frac{4}{h}\right)J_3$$

代入上面的方程,就得到

$$\Delta(I_\alpha) = I_\alpha \otimes 1 + 1 \otimes I_\alpha (\alpha = \pm, 3), \tag{12.5.29}$$

$$\Delta(J_{\pm}) = J_{\pm} \otimes 1 + 1 \otimes J_{\pm} \mp \frac{h}{2}(I_3 \otimes I_{\pm} - I_{\pm} \otimes I_3) \tag{12.5.30}$$

$$- \frac{h}{4}(I_{\pm} \otimes T_0^{(1)} + T_0^{(1)} \otimes I_{\pm}),$$

$$\Delta(J_3) = J_3 \otimes 1 + 1 \otimes J_3 + \frac{h}{4}(I_+ \otimes I_- - I_- \otimes I_+) \tag{12.5.31}$$

$$- \frac{h}{4}(I_3 \otimes T_0^{(1)} + T_0^{(1)} \otimes I_3),$$

$$\Delta T_0^{(1)} = T_0^{(1)} = T_0^{(1)} \otimes 1 + 1 \otimes T_0^{(1)}, \tag{12.5.32}$$

$$\Delta(T_0^{(2)}) = T_0^{(2)} \otimes 1 + 1 \otimes T_0^{(2)} + 2I_3 \otimes I_3$$

$$+ I_+ \otimes I_- + I_- \otimes I_+ + \frac{1}{2} T_0^{(1)} \otimes T_0^{(1)}.$$

如果我们选择 $T_0^{(1)} = 0$, $T_0^{(2)} = I^2$,就得到

$$\Delta(I_\lambda) = I_\lambda \otimes 1 + 1 \otimes I_\lambda, \tag{12.5.33}$$

$$\Delta(J_\lambda)=J_\lambda\otimes 1+1\otimes J_\lambda+\frac{h}{2}\mathrm{i}\epsilon_{\lambda\mu\nu}I_\nu\otimes I_\mu$$
$$-\frac{h}{4}(I_\lambda\otimes T_0^{(1)}+T_1^{(1)}\otimes I_\lambda).$$

此处 λ $\mu,v=1,2,3$，以及

$$\begin{aligned}\Delta(\boldsymbol{I}^2)&=\Delta\left(I_3^2+\frac{1}{2}I_+\ I_-+\frac{1}{2}I_-\ I_+\right)\\&=(\Delta I_3)\Delta(I_3)+\frac{1}{2}\Delta(I_+)\Delta(I_-)+\frac{1}{2}\Delta(I_-)\Delta(I_+)\\&=\boldsymbol{I}^2\otimes 1+1\otimes\boldsymbol{I}^2+2I_3\otimes I_3+I_+\otimes I_-+I_-\otimes I_+.\end{aligned}$$

最后我们得到原先由 Drinfeld 给出的余乘的定义：

$$\begin{aligned}\Delta(I_\lambda)&=I_\lambda\otimes 1+1\otimes I_\lambda,\\\Delta(J_\lambda)&=J_\lambda\otimes 1+1\otimes J_\lambda+\frac{h}{2}C_{\lambda\mu\nu}I_\nu\otimes I_\mu.\end{aligned}\tag{12.5.34}$$

在我们的例子中 $C_{\lambda\mu\nu}=\mathrm{i}\epsilon_{\lambda\mu\nu}$. 一般来说 $C_{\lambda\mu\nu}$ 是给定半单纯 Lie 代数的反对称张量.

有了上面的讨论，我们现在可以给一个与 $SL(2)$ 相关联的 Yangian 的简明定义. 令 $\boldsymbol{R}(u)$ 满足杨-Baxter 方程(YBE)并有 u 多项式的形式，并且 $\boldsymbol{T}(u)$ 满足 RTT 关系，这样在 $\boldsymbol{T}(u)$ 幂级数展开中的 u^{-1} 与 u^{-2} 的系数/算符就组成了 Yangian 生成元，他们的对易关系由 RTT 关系决定，而且 RTT 是和余乘相恰合的. 对易关系和余乘是 Yangian 的两个要素. 如果我们从 RTT 关系得到 $\{I_\alpha\}$ 的对易关系(与 u^{-1} 相关联的)和 $\{J_\alpha\}$ 的对易关系(与 u^{-2} 相关联的)，余乘就自动成立. 当 $\det\boldsymbol{T}(u)=1$ 时，Yangian 就是 $Y(SL(2))$，当 $\det\boldsymbol{T}(u)\neq 1$ 时，Yangian 就是 $Y(gL(2))$，它通过 RTT 关系和 Haldane-Shastry 模型相关联.

Drinfeld 得到了 Yangian 以下的重要性质. 如果 $\boldsymbol{R}(u)$ 是 u 的多项式形式(包括上面讨论的 $\check{\boldsymbol{R}}=\boldsymbol{I}+u\boldsymbol{P}$)，它被称为 YBE 的有理解. 对于有理解，只要知道 I_α 和 J_α(一共有 6 个生成元)就足以唯一地决定所有的高阶元素 $T_\alpha^{(n)}(n\geqslant 3;\ \alpha=+,-,3)$ 和它们的对易关系. $T_\alpha^{(n)}$ 组成了无穷多维的代数，但这个代数是由有限数量的生成元(在当前情况下是 6 个)决定的. 这可以和 Lie 群与 Lie 代数的关系相比较. 一个 Lie 群由 Lie 代数所决定，在原点处一个群元素对于群参数的一阶导数(Lie 代数的生成元)决定 Lie 群的行为. 现在 $\boldsymbol{T}(u)$ 不仅由 $T_\alpha^{(1)}(\alpha=+,-,3)$ 所决定，也要由 $T_\alpha^{(2)}$ 所决定. 另一类 YBE 的解是三角解，它对参数 u 有周期性. 我们将在以后来讨论.

本节的内容基于文献[6,7]和量子群有关的书籍列在文献[10～27]中.

作为代数 $SL(2)$ 的延伸，$Y(SL(2))$ 的表示理论是由 V. Chari 和 A. Pressley[12] 给出的. 我们愿意强调 $Y(SL(2))$ 是无穷维的代数，但它具有有限维的表示. 文献[12]给出了详尽的讨论.

12.6 RTT 关系展开式与对易关系

对 $\check{\boldsymbol{R}}(u)=\boldsymbol{I}+u\boldsymbol{P}$，RTT 关系给出式(12.5.4)：

$$(u-v)[T_{bc}(u),T_{ad}(v)]+T_{ac}(u)T_{bd}(v)-T_{ac}(v)T_{bd}(u)=0.$$

将 $\boldsymbol{T}(u)$ 对 u^{-n} 展开式(12.5.16)代入，按 u 与 v 相应幂次分开，$\boldsymbol{T}^{(0)}$ 的各元素必定为 c 数. 由

于 RTT 关系允许做变换，$\boldsymbol{T}^{(0)}$ 可以对角化，故一般有

$$\boldsymbol{T}^{(0)}=\begin{bmatrix}1&0\\0&\lambda\end{bmatrix},\tag{12.6.1}$$

λ 为任意常数，在 λ 不为 0 时可选

$$\boldsymbol{T}^{(0)}=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}.\tag{12.6.2}$$

其余各阶算符满足

$$[T_{bc}^{(n+1)},T_{ad}^{(m)}]-[T_{bc}^{(n)},T_{ad}^{(m+1)}]+T_{ac}^{(n)}T_{bd}^{(m)}-T_{ac}^{(m)}T_{bd}^{(n)}=0.\tag{12.6.3}$$

观察上式，取 $a=b,c=d$，然后固定 n，让 m 随意变化，就得出

$$[T_{ab}^{(n)},T_{ab}^{(m)}]=0.$$

将式(12.6.3)中 m 与 n 互换，a 与 b 互换，c 与 d 互换. 取其结果与式(12.6.3)之差，可以得出

$$[T_{ab}^{(n)},T_{cd}^{(m)}]=[T_{ab}^{(m)},T_{cd}^{(n)}].\tag{12.6.4}$$

将式(12.6.3)对 $T_\alpha^{(n)},T_\beta^{(m)}(\alpha,\beta=+,-,3,0)$ 取不同的 α,β 以及 m,n 值时的关系写出具体表达式，分别得到

$$\left.\begin{aligned}&[T_\alpha^{(1)},T_\alpha^{(2)}]=0,\quad \alpha=+,-,3,\\&[T_3^{(1)},T_\pm^{(k)}]=[T_3^{(k)},T_\pm^{(1)}]=\pm 2T_\pm^{(k)},\quad k=1,2,\\&[T_+^{(1)},T_-^{(k)}]=[T_+^{(k)},T_-^{(1)}]=T_3^{(k)},\ k=1,2;\end{aligned}\right\}\tag{12.6.5}$$

$$\left.\begin{aligned}&[T_0^{(1)},T_\alpha^{(k)}]=[T_0^{(k)},T_\alpha^{(1)}]=0,\quad \alpha=\pm,3,0,\quad k=1,2,\\&[T_0^{(2)},T_\pm^{(2)}]=\pm(T_3^{(1)}T_\pm^{(2)}-T_3^{(2)}T_\pm^{(1)}),\\&[T_0^{(2)},T_3^{(2)}]=2(T_+^{(1)}T_-^{(2)}-T_+^{(2)}T_-^{(1)});\end{aligned}\right\}\tag{12.6.6}$$

$$\left.\begin{aligned}&T_\pm^{(n+1)}=\frac{1}{2}(\pm[T_3^{(2)},T_\pm^{(n)}]+T_0^{(n)}T_\pm^{(1)}-T_0^{(1)}T_\pm^{(n)}),\ n\geqslant 2,\\&T_3^{(n+1)}=[T_+^{(n)},T_-^{(2)}]+\frac{1}{2}(T_0^{(n)}T_3^{(1)}-T_0^{(1)}T_3^{(n)}),n\geqslant 2;\end{aligned}\right\}\tag{12.6.7}$$

$$[T_\alpha^{(n)},T_\alpha^{(m)}]=0,\ \alpha=\pm,3,0,\ m,n\geqslant 2.\tag{12.6.8}$$

此外，还有

$$\left.\begin{aligned}&[T_\alpha^{(m)},T_\beta^{(n)}]=[T_\alpha^{(n)},T_\beta^{(m)}],\alpha\neq\beta,m<n,\ n>2,\\&[T_0^{(n+1)},T_\pm^{(m)}]-[T_0^{(n)},T_\pm^{(m+1)}]\pm(T_3^{(m)}T_\pm^{(n)}-T_3^{(n)}T_\pm^{(m)})=0,\\&[T_0^{(n+1)},T_3^{(m)}]-[T_0^{(n)},T_3^{(m+1)}]+2(T_+^{(m)}T_-^{(n)}-T_+^{(n)}T_-^{(m)})=0,\\&[T_3^{(n+1)},T_\pm^{(m)}]-[T_3^{(n)},T_\pm^{(m+1)}]\pm(T_0^{(m)}T_\pm^{(n)}-T_0^{(n)}T_\pm^{(m)})=0,\\&[T_+^{(n+1)},T_-^{(m)}]-[T_+^{(n)},T_-^{(m+1)}]+\frac{1}{2}(T_0^{(m)}T_3^{(n)}-T_0^{(n)}T_3^{(m)})=0,\ m<n,\ n>2.\end{aligned}\right\}\tag{12.6.9}$$

以上关系中仅式(12.6.5)～式(12.6.8)是独立的. 经过复杂的计算，式(12.6.9)可以从它们推出.

式(12.6.5)，式(12.6.6)给出 $\boldsymbol{T}^{(1)},\boldsymbol{T}^{(2)}$ 诸矩阵元($\alpha=\pm,3,0$)间的对易关系，式(12.6.7)是重要的递推关系. 给出 $\boldsymbol{T}^{(1)},\boldsymbol{T}^{(2)}$ 便可以给出 $\boldsymbol{T}^{(3)}$，然后可以给出 $\boldsymbol{T}^{(4)},\cdots$，即 $\boldsymbol{T}^{(1)}$ 与 $\boldsymbol{T}^{(2)}$ 决定任意 $\boldsymbol{T}^{(n)}(n\geqslant 3)$，式(12.6.8)则反映了对高阶 $\boldsymbol{T}^{(n)}$ 的限制. 在 $\alpha=+,-,3$ 时，利用式(12.6.7)代

入式(12.6.8)得出

$$\left.\begin{aligned}&[T_{\pm}^{(m)},[T_3^{(2)},T_{\pm}^{(n)}]]\pm[T_{\pm}^{(m)},T_0^{(n)}]T_{\pm}^{(1)}=0,\\&2[T_3^{(m)},[T_+^{(n)},T_-^{(2)}]]+[T_3^{(m)},T_0^{(n)}]T_3^{(1)}=0,m,n\geqslant 2.\end{aligned}\right\}\tag{12.6.10}$$

在 $m=n=2$ 时,用式(12.6.6)可将上式化为

$$[T_{\pm}^{(2)},[T_3^{(2)},T_{\pm}^{(2)}]]=(T_3^{(1)}T_{\pm}^{(2)}-T_3^{(2)}T_{\pm}^{(1)})T_{\pm}^{(1)},\tag{12.6.11}$$

$$[T_3^{(2)},[T_+^{(2)},T_-^{(2)}]]=(T_+^{(1)}T_-^{(2)}-T_+^{(2)}T_-^{(1)})T_3^{(1)}.\tag{12.6.12}$$

利用式(12.6.5)求 $T_{\pm}^{(1)}$ 与式(12.6.12)的对易括号,可推出

$$\begin{aligned}&2[T_{\pm}^{(2)},[T_+^{(2)},T_-^{(2)}]]\pm[T_3^{(2)},[T_3^{(2)},T_{\pm}^{(2)}]]\\&=2(T_+^{(1)}T_-^{(2)}-T_+^{(2)}T_-^{(1)})T_{\pm}^{(1)}\pm(T_3^{(1)}T_{\pm}^{(2)}-T_3^{(2)}T_{\pm}^{(1)})T_3^{(1)}.\end{aligned}\tag{12.6.13}$$

式(12.6.5)取 $k=2$,连同式(12.6.11),式(12.6.12)正是 Yangian 对易关系,即式(11.1.13),式(11.1.14),式(11.1.17),式(11.1.18).

有意思的是 $T_0^{(2)}$. 由于 RTT 关系,它不是任意的,要受式(12.6.6)的限制. 已知 $\boldsymbol{I}$ 与 $\boldsymbol{J}$ 的物理实现,便通过 $T_0^{(2)}=T_{22}^{(2)}+T_{11}^{(2)}$(式(12.5.17))确定了 $T_0^{(2)}$,再由式(12.5.21)得到 C_2. 它是整个代数的"中心",因为 $\widetilde{\det}\boldsymbol{T}(u)$ 与所有算符 $T_{ab}(u)$ 对易.

直接解式(11.1.13),式(11.1.14),式(11.1.17),式(11.1.18)实现 $\boldsymbol{I}$ 与 $\boldsymbol{J}$ 再求 $T_0^{(2)}$ 是不容易的,目前较为成功的是一维长程链模型. 但下节中仍以氢原子为例,由于它是单体问题,整个问题变得简单,可以对 RTT 关系及其各阶 $\boldsymbol{T}(u)$ 算符和对易关系有具体的了解.

本节内容请参阅文献[6,7].

12.7 氢原子与 RTT 关系

经过本章前面的讨论,对 YBE,RTT 关系有了理解. 现在回过来看一下氢原子在这些方面还有什么表现. 首先重新定义 $\boldsymbol{J}$,不用标度化的 Runge-Lenz 矢量而用原始的矢量 $\boldsymbol{M}$,目的是显现 Hamilton 量 H 的标度作用. 定义

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{b}\equiv-\boldsymbol{L}\times\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\boldsymbol{M}.\tag{12.7.1}$$

显然 $\boldsymbol{L}$ 与 $\boldsymbol{J}$ 的对易关系仍然是

$$[L_\alpha,J_\beta]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\gamma.\tag{12.7.2}$$

另有

$$[J_\alpha,J_\beta]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}L_\gamma(H\boldsymbol{L}^2-\boldsymbol{b}^2-H).$$

仍设质量 $m=1,\hbar=1$,并注意

$$\boldsymbol{b}^2=-\frac{1}{2}\boldsymbol{M}^2=-\frac{1}{2}(2H\boldsymbol{L}^2+2H+k^2),\tag{12.7.3}$$

就得到

$$[J_\alpha,J_\beta]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}L_\gamma\left(2H\boldsymbol{L}^2+\frac{1}{2}k^2\right).\tag{12.7.4}$$

用$(+,-,3)$分量,式(12.7.1)是

$$\left.\begin{aligned} J_{\pm} &= \pm\frac{1}{\sqrt{2}}(L_3 M_{\pm} - L_{\pm} M_3), \\ J_3 &= \frac{1}{2\sqrt{2}}(L_+ M_- - L_- M_+). \end{aligned}\right\} \tag{12.7.5}$$

用 $\boldsymbol{I}^2$ 与 $\boldsymbol{J}$ 的对易关系

$$\left.\begin{aligned} [\boldsymbol{I}^2, J_{\pm}] &= \pm 2[I_3 J_{\pm} - J_3 J_{\pm}], \\ [\boldsymbol{I}^2, J_3] &= I_+ J_- - J_+ I_-, \end{aligned}\right\} \tag{12.7.6}$$

则得到

$$\begin{aligned} [J_{\pm}, [J_3, J_{\pm}]] &= (-4H) I_{\pm} (I_3 J_{\pm} - J_3 I_{\pm}), \\ [J_3, [J_+, J_-]] &= (-4H) I_3 (I_+ J_- - J_+ J_-). \end{aligned} \tag{12.7.7}$$

关系的推导与11.1节的完全相同，这里只是明显地呈现出因子$(-4H)$，它可以通过重新定义 $\boldsymbol{J}$ 而消除. 对于束缚态，$E<0$，因此$-4H$ 是正值. 在第4章中我们看到再标度是定出氢原子束缚态能谱的关键.

式(12.7.1)可以写作

$$J_\alpha = -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\varepsilon_{\alpha\beta\sigma} L_\beta M_\sigma = -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\left(\varepsilon_{\alpha\beta\sigma}\varepsilon_{\sigma\tau\rho} L_\rho L_\tau p_\rho - \mathrm{i}(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_\alpha + \frac{k}{r}(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{r})_\alpha\right).$$

经过直接计算得到

$$J_\alpha = -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\left(\frac{k}{r}(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{r})_\alpha - \boldsymbol{L}^2 p_\alpha\right). \tag{12.7.8}$$

在11.3节(式(11.3.15))曾讨论到 L_α 与 $\boldsymbol{L}^2 p_\alpha$ 组成 Yangian 生成元，此处多了一项$\frac{k}{r}(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{r})_\alpha$. 对氢原子而言，$\boldsymbol{L}^2\boldsymbol{p}$ 与 H 不对易，而此处 $\boldsymbol{J}$(式(12.7.8))不但和 $\boldsymbol{L}$ 组成 Yangian，而且和 H 对易.

在11.3节中曾讨论到 $\boldsymbol{J}\to\boldsymbol{J}+F\boldsymbol{I}$ 仍和 $\boldsymbol{J}$ 一样，满足 Yangian 的各对易关系，F 是 Yangian 的 Casimir 算符. 现在作 $\boldsymbol{J}$ 的平移：

$$\boldsymbol{J}\to\boldsymbol{\mathcal{J}} = \boldsymbol{J} + F\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{b} + F\boldsymbol{L}, \tag{12.7.9}$$

$$[F, \boldsymbol{L}] = [F, \boldsymbol{M}] = 0. \tag{12.7.10}$$

此时$\boldsymbol{\mathcal{J}}$的对易关系是

$$[\mathcal{J}_\alpha, \mathcal{J}_\beta] = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\sigma}\left\{\left(2H\boldsymbol{L}^2 + \frac{1}{2}k^2\right)L_\sigma + 2F\mathcal{J}_\sigma\right\}. \tag{12.7.11}$$

所有 Yangian 对易关系(例如式(12.7.7))都对$\boldsymbol{\mathcal{J}}$成立. 仿式(12.5.19)，将 I_α，$\mathcal{J}_\alpha$ 与 $T_\alpha^{(1)}$，$T_\alpha^{(2)}$ 联系起来，

$$\left.\begin{aligned} T_{\pm}^{(1)} &= I_{\pm} = L_{\pm}, & T_3^{(1)} &= I_3 = L_3, \\ T_{\pm}^{(2)} &= G\mathcal{J}_{\pm}, & T_3^{(2)} &= G\mathcal{J}_3, \end{aligned}\right\} \tag{12.7.12}$$

G 也是 Casimir 算符. 由于

$$\begin{aligned} [T_3^{(2)}, T_{\pm}^{(2)}] &= 2G^2[\mathcal{J}_3, \mathcal{J}_{\pm}] \\ &= \pm 2G^2\left\{\left(2H\boldsymbol{I}^2 + F^2 + \frac{1}{2}k^2\right)I_{\pm} + 2F\mathcal{J}_{\pm}\right\}, \end{aligned} \tag{12.7.13}$$

可以通过递推关系式(12.6.7)得到 $T_{\pm}^{(3)}$：

$$T_{\pm}^{(3)}=\frac{1}{2}(\pm[T_3^{(2)},T_{\pm}^{(2)}]+T_0^{(2)}T_{\pm}^{(1)}-T_0^{(1)}T_{\pm}^{(2)})$$

$$=\frac{1}{2}\left\{\left(2G^2\left(2H\boldsymbol{I}^2+F^2+\frac{1}{2}k^2\right)+T_0^{(2)}\right)I_{\pm}+(4G^2F-T_0^{(1)}G)\mathscr{J}_{\pm}\right\}. \quad (12.7.14)$$

类似地可得 $T_3^{(3)}$：

$$T_3^{(3)}=[T_+^{(2)},T_-^{(2)}]+\frac{1}{2}(T_0^{(2)}T_3^{(1)}-T_0^{(1)}T_3^{(2)})$$

$$=\left\{2G^2\left(2H\boldsymbol{I}^2+F^2+\frac{1}{2}k^2\right)+T_0^{(2)}\right\}I_3+(4G^2F-T_0^{(1)}G)\mathscr{J}_3. \quad (12.7.15)$$

由式(12.5.21)知道 $T_0^{(1)}=C_1$ 与任意 $T_\alpha^{(n)}(\alpha=\pm,3)$ 对易，可以选它为 G 与 F 的组合：

$$T_0^{(1)}=4GF. \quad (12.7.16)$$

$T_0^{(2)}$ 由式(12.6.6)所限制：

$$\left.\begin{aligned}&[T_0^{(2)},\mathscr{J}_{\pm}]=\pm 2(I_3\mathscr{J}_{\pm}-\mathscr{J}_3I_{\pm}),\\&[T_0^{(2)},\mathscr{J}_3]=I_+\mathscr{J}_--\mathscr{J}_+I_-.\end{aligned}\right\} \quad (12.7.17)$$

由于$\mathscr{J}$与 $\boldsymbol{J}$ 相差 $F\boldsymbol{I}$，而$[I^2,I_\alpha]=0$，因此式(12.7.6)对$\mathscr{J}$也成立．由此可知

$$T_0^{(2)}=2\boldsymbol{I}^2+Q, \quad (12.7.18)$$

其中 Q 为与$(\boldsymbol{I},\mathscr{J})$对易的算符集合．因为 H 与 $\boldsymbol{I},\mathscr{J}$ 对易，我们可以选

$$T_0^{(2)}=-2G^2\left(2H\boldsymbol{I}^2+F^2+\frac{1}{2}k^2\right), \quad (12.7.19)$$

目的是这种选择连同式(12.7.16)可以使 $T_\alpha^{(3)}=0$（这点只要将式(12.7.12)和 $T_0^{(1)}$，$T_0^{(2)}$ 的选择代入式(12.7.14)，式(12.7.15)中即可看到)，从而使所有的 $T_\alpha^{(m)}=0(m\geqslant 3)$．这使得转移矩阵 $\boldsymbol{T}(u)$的展开到 u^{-2}，以后自动中断，即氢原子只有有限守恒量这个物理要求得以实现．比较式(12.7.18)和式(12.7.19)，得

$$G=(-2H)^{-1/2}. \quad (12.7.20)$$

$T_0^{(1)}$ 与所有生成元对易，而式(12.7.16)中的 F 尚未选定．要求

$$T_0^{(1)}=H \quad (12.7.21)$$

就选定了 F：

$$F=\frac{1}{4G}T_0^{(1)}=\pm\frac{\mathrm{i}}{2\sqrt{2}}H^{3/2}. \quad (12.7.22)$$

总结起来，氢原子全部转移矩阵展开的算符是

$$T_{\pm}^{(1)}=I_{\pm}=L_{\pm},\quad T_3^{(1)}=2L_3,\quad T_0^{(1)}=H;$$
$$T_{\pm}^{(2)}=\pm\mathrm{i}(2H)^{-1/2}\mathscr{J}_{\pm},\quad T_3^{(2)}=\pm\mathrm{i}(2H)^{-1/2}\mathscr{J}_3,$$
$$T_0^{(2)}=\boldsymbol{I}^2+H^{-1}\left(\frac{1}{2}k^2-\frac{1}{8}H^3\right), \quad (12.7.23)$$

高阶系数均为 0. Yangian 生成元是

$$\boldsymbol{I}=\boldsymbol{L}$$
$$\mathscr{J}=-\frac{i}{\sqrt{2}}\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{M}\mp\frac{\mathrm{i}}{2\sqrt{2}}H^{3/2}\boldsymbol{L}. \quad (12.7.24)$$

量子行列式的展开系数是

$$C_1=T_0^{(1)}=H,$$

$$
\begin{aligned}
C_2 &= T_0^{(2)} - \boldsymbol{I}^2 + \frac{1}{2}T_0^{(1)}\left(1 + \frac{1}{2}T_0^{(1)}\right) \\
&= \frac{1}{2}k^2 H^{-1} + \frac{1}{2}H - \frac{1}{8}H^2, \qquad (12.7.25) \\
&\cdots.
\end{aligned}
$$

其余 $C_n(n>2)$均为 H 的函数. 明显的 $\boldsymbol{T}(u)$表示是

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{T}(u) &= \boldsymbol{I} + u^{-1}\begin{bmatrix} \frac{H}{2} - I_3 & I_+ \\ I_- & \frac{H}{2} + I_3 \end{bmatrix} \\
&+ u^{-2}\begin{bmatrix} \frac{1}{2}T_0^{(2)} \mp \mathrm{i}(2H)^{-1/2}\mathscr{J}_3 & \pm \mathrm{i}(2H)^{-1/2}\mathscr{J}_+ \\ \pm \mathrm{i}(2H)^{-1/2}\mathscr{J}_- & \frac{1}{2}T_0^{(2)} \pm \mathrm{i}(2H)^{-1/2}\mathscr{J}_3 \end{bmatrix} \qquad (12.7.26)
\end{aligned}
$$

综上所述,氢原子是最简单的满足 RTT 关系的一例. 它的 Hamilton 量并非由 RTT 关系(即它的解 $\boldsymbol{T}(u)$)确定,而它就是量子行列式最低阶非平凡项 C_1,所有更高阶 $C_n(n\geqslant 2)$都是 H 的函数. 按 RTT 关系一般形式,$\boldsymbol{T}(u)$对 u^{-1}的展开式应为无限阶,但在特殊模型中,它可以为有限的,对应有限个守恒量. 由这个例子也可初步了解 Yangian 在氢原子中的表现.

本节内容请参阅文献[14].

以上讨论的内容都限于 YBE 的有理解. 和 YBE 单周期解(三角解)相关的代数称为量子代数,许多量子理论的问题和它有关,将在下面讨论.

12.8 Yangian 的表示和氢原子能谱[29]

从 11.1 节～11.3 节我们看到轨道角动量算符 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{I}$ 和标度的 Runge-Lenz 矢量 $\boldsymbol{B}$ 组成了一个 $SO(4)$代数. 它们的线性组合

$$
\boldsymbol{L}_1 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{B}), \boldsymbol{L}_2 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{L} - \boldsymbol{B}) \qquad (12.8.1)
$$

组成了两个对易的 $SO(2)$代数. 在线性组合之外,我们还可以引入新的张量算符

$$
\boldsymbol{J} = \frac{\mathrm{i}}{4}\boldsymbol{L} \times \boldsymbol{B}. \qquad (12.8.2)
$$

显然 $\boldsymbol{I}$ 和 $\boldsymbol{J}$ 组成的集合超越了 Lie 代数的范畴. 这个集合的算符作用于张量空间,它包含由 $\boldsymbol{I}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 所张成的空间的交. (注意式(12.8.2)与式(11.1.4)不同,相差一个因子 2 和标准的 Yangian 关系式(11.2.11)相比,式(11.1.4)应该用因子$\frac{1}{2}$重新标度). Yangian 独立地在张量空间中操作,并有自己的表示理论[12]. 现在我们问这个表示能否决定正确的氢原子能谱? 这就是要验证 $Y(SL(2))$表示理论能否用于氢原子.

我们从轨道角动量和标度的 Runge-Lenz 矢量开始,设磁单极不存在.

$$
\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{B} = 0, \qquad (12.8.3)
$$

我们有

$$
\boldsymbol{L}_1^2 = \boldsymbol{L}_2^2 = \frac{1}{4}(\boldsymbol{L}^2 + \boldsymbol{B}^2). \qquad (12.8.4a)
$$

在矢量空间中，如在 4.3.2 节中所示，对称性导致氢原子能谱. 现在我们从 $Y(SU(2))$ 或$\{\boldsymbol{L},\boldsymbol{J}\}$开始重新推导氢原子能谱. 我们将利用

$$\boldsymbol{J}^2 = -\frac{1}{16}\{\boldsymbol{L}^2(\boldsymbol{B}^2-1)-(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{B})^2\} = -\frac{1}{16}\boldsymbol{L}^2(\boldsymbol{B}^2-1). \tag{12.8.4b}$$

令 $\boldsymbol{L}^2=(\boldsymbol{L}_1+\boldsymbol{L}_2)^2$ 的量子数为 $l=2k,2k-1,\cdots,0$. 一般情况下，权重为

$$l = 2k-p\ (p=0,1,\cdots,2k), \tag{12.8.5}$$

其中 $\boldsymbol{L}_1^2=\boldsymbol{L}_2^2=k(k+1)$. 容易找到 $\boldsymbol{L}_1\cdot\boldsymbol{L}_2$ 的本征值为

$\frac{1}{2}[l(l+1)-2k(k+1)]$. 由于

$$\boldsymbol{B}^2 = \boldsymbol{L}_1^2+\boldsymbol{L}_2^2-2\boldsymbol{L}_1\cdot\boldsymbol{L}_2, \tag{12.8.6}$$

我们求得 $\boldsymbol{B}^2$ 的本征值为 $4k(k+1)-l(l+1)$，因此 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征值为

$$J(J+1) = -\frac{1}{16}l(l+1)\{4k(k+1)-l(l+1)-1\}. \tag{12.8.7}$$

我们还有

$$\boldsymbol{B}^2 = -\left(\boldsymbol{L}^2+\frac{\mathcal{K}^2}{2E}+1\right), \tag{12.8.8}$$

并从式(12.8.8)和式(12.8.4)得到

$$\boldsymbol{J}^2 = \frac{1}{16}\boldsymbol{L}^2\left(\boldsymbol{L}^2+\frac{\mathcal{K}^2}{2E}+2\right), \tag{12.8.9}$$

或

$$\boldsymbol{J}^2 = \frac{1}{16}l(l+1)\left\{l(l+1)+\frac{\mathcal{K}^2}{2E}+2\right\}, \tag{12.8.10}$$

将式(12.8.10)与式(12.8.7)比较，就得到

$$\frac{\mathcal{K}^2}{2E} = -[4k(k+1)+1], \tag{12.8.11}$$

即

$$E = -\frac{\mathcal{K}^2}{2(2k+1)^2} = -\frac{\mathcal{K}^2}{2n^2}. \tag{12.8.12}$$

此处 $n=2k+1$，k 取值为 $0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},\cdots$，将式(12.8.5)代入式(12.8.7)，得到

$$\boldsymbol{J}^2 = -\frac{1}{16}(2k-p)(2k-p+1)\{4k(k+1)-(2k-p)(2k-p+1)-1\}. \tag{12.8.13}$$

这表明 $Y(SU(2))$在量子张量空间中也能给出氢原子的正确能谱.

因为集合$\{\boldsymbol{L},\boldsymbol{J}\}$满足 $Y(SU(2))$，且 $Y(SU(2))$有它自己的独立的表示理论，那么关于氢原子的式(12.8.13)是如何与 $Y(SU(2))$的表示理论联系起来的呢？现在 $\boldsymbol{J}$ 是由 Lie 代数的两个生成元直积组成的. 令 e_m 为 $SU(2)$的权重为 m 的基，这样我们就应将张量积的基选为[12]

$$\Omega_p = \sum_{i=0}^{p}(-1)^i\frac{(m-i)!(n-p+i)!}{m!(n-p)!}e_{m-i}\otimes e_{n-p+i}\ (0\leqslant p\leqslant \min(m,n)), \tag{12.8.14}$$

将 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_1+\boldsymbol{L}_2$ 和 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{L}_1-\boldsymbol{L}_2$ 代入式(12.8.2),就得到

$$\boldsymbol{J}=a\boldsymbol{L}_1+b\boldsymbol{L}_2-\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{L}_1\times\boldsymbol{L}_2. \tag{12.8.15}$$

此处对氢原子 $a=-\frac{1}{4}$,$b=\frac{1}{4}$. 容易证明在式(12.8.15)中定义的 $\boldsymbol{J}$ 对任意参数 a 和 b 都满足 Yangian 对易关系. 注意

$$\boldsymbol{J}^2=\frac{1}{2}(J_+J_-+J_-J_+)+J_3^2, \tag{12.8.16}$$

将 $\boldsymbol{J}^2$ 作用于 $\boldsymbol{\Omega}_p$,就得到本征值

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2=&l_1(l_1+1)a^2+l_2(l_2+1)b^2+\{2(l_1-p)(l_2-p)-p(p+1)\}ab\\&-\frac{1}{4}\left\{(l_1+l_2)l_1l_2+\frac{p}{4}(2l_1+2l_2+1-p)[4l_1l_2+2-p(2l_1+2l_2+1-p)]\right\}.\end{aligned} \tag{12.8.17a}$$

这个表达式可以看作是 Chari 和 Pressley 的 $Y(SU(2))$ 表示理论的直接结果,我们所作的是计算 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征值.

将 $b=-a=\frac{1}{4}$ 代入 $\boldsymbol{J}^2$,并考虑 $l_1=l_2=k$(因为 $l_1^2=l_2^2$),我们发现式(12.8.17)变为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2=&\frac{1}{16}\{2k(k+1)-2(k-p)^2+p(p+1)-8k^3-p(4k+1-p)\\&\cdot[4k^2+2-p(4k+1-p)]\}\\=&\frac{1}{16}(2k-p)\{1-2k(2k+p)-4k^2p+2k^2p-2kp+p^2\\&-p[4k^2+2-p(4k+1-p)]\}\\=&-\frac{1}{16}(2k-p)(2k-p+1)\{4k(k+1)-(2k-p)(2k-p+1)-1\}.\end{aligned} \tag{12.8.17b}$$

它和式(12.8.13)是等同的. 这表明我们对氢原子所得到的结果与 $Y(SU(2))$ 表示理论相同,这意味着从量子张量空间看,Chari-Pressley 的 Yangian 确实能够导致氢原子能谱的正确结果.

下面我们来考虑包括磁单极的情况. 体系的 Hamilton 量由下式给出

$$\mathcal{H}=\frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2\mu}+\frac{1}{2\mu}\frac{q^2}{r^2}-\frac{\kappa}{r},\boldsymbol{\pi}=\boldsymbol{p}-Ze\boldsymbol{A}, \tag{12.8.18}$$

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\pi}-q\frac{\boldsymbol{r}}{r},\boldsymbol{B}=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2\mu E}}\cdot\frac{1}{2}(\boldsymbol{\pi}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{\pi})-\frac{\mu x}{r}\boldsymbol{r}. \tag{12.8.19}$$

现在 $SO(4)$ 代数是由角动量 $\boldsymbol{L}$ 和重新标度的 Runge-Lenz 矢量 $\boldsymbol{B}$ 所组成,此处 μ 是约化质量,$q=Zeg$,g 是磁荷,$\kappa=Ze^2$. $\boldsymbol{A}$ 是磁单极的吴大峻-杨振宁势[31]. 容易算出

$$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_1^2-\boldsymbol{L}_2^2=q\sqrt{-\frac{\mu x^2}{2E}}, \tag{12.8.20}$$

$$\boldsymbol{L}_1^2=\frac{1}{4}\left[\left(q+\sqrt{-\frac{\mu x^2}{2E}}\right)^2-1\right]=l_1(l_1+1). \tag{12.8.21}$$

并且确定

$$q=|l_1-l_2| \tag{12.8.22}$$

以及能谱：

$$\varepsilon_n = -\frac{\mu x^2}{2}\frac{1}{n^2}, n = l_1 + l_2 + 1. \tag{12.8.23}$$

这表明 ε_n 对于 q 是简并的. 因为 l_1 和 l_2 取值为 $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots$ 因此

$$q = \begin{cases} 0, 1, \cdots, n-1, & n = \text{整数}, \\ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \cdots, n-1, & n = \text{半整数}. \end{cases} \tag{12.8.24}$$

同时，虽然 $l = l_1 + l_2 - p = n - p + 1$ 和 q 的取值范围相同，这绝不意味着 $q = l$（注意 l 是和 $\boldsymbol{L}^2$ 的本征值 $l(l+1)$ 相联系的）. 例如，我们可以有以下的组合：

$$\begin{aligned}
&n = 1 \quad (l_1 = l_2 = 0):\ l = q = 0 \\
&n = \frac{3}{2} \quad \left(l_1 = \frac{1}{2}, l_2 = 0;\ l_1 = 0, l_2 = \frac{1}{2}\right):\ l = q = \frac{1}{2} \\
&n = 2 \quad \left(l_1 = 1, l_2 = 0;\ l_1 = 0, l_2 = 1;\ l_1 = l_2 = \frac{1}{2}\right): \\
&\qquad l_1 = 1, l_2 = 0 \text{ 或 } l_1 = 0, l_2 = 1 \qquad :\ l = 1, 0, q = 1 \\
&\qquad l_1 = l_2 = \frac{1}{2} \qquad :\ l = 1, 0, q = 0 \\
&n = \frac{5}{2} \quad \left(l_1 = \frac{3}{2}, l_2 = 0 \text{ 或 } l_1 = 0, l_2 = \frac{3}{2}\right): \qquad l = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, q = \frac{3}{2} \\
&\qquad \left(l_1 = 1, l_2 = \frac{1}{2} \text{ 或 } l_1 = \frac{1}{2}, l_2 = 1\right): \qquad l = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, q = \frac{1}{2} \\
&\qquad (l_1 = 2, l_2 = 0 \text{ 或 } l_1 = 0, l_2 = 2): \qquad l = 2, 1, 0, q = 2 \\
&n = 3 \quad \left(l_1 = \frac{3}{2}, l_2 = \frac{1}{2} \text{ 或 } l_1 = \frac{1}{2}, l_2 = \frac{3}{2}\right):\ l = 2, 1, q = 1 \\
&\qquad (l_1 = l_2 = 1): \qquad l = 2, 1, 0, q = 0
\end{aligned} \tag{12.8.25}$$

我们看到，从 $n=3$ 开始，当 $q \neq 0$ 时有两个五重态（$l=2$）和两个三重态（$l=1$）. 它们不能用 l 和 $l_3 = m$ 加以区别，但却能用 q 加以区别. 当 $q \neq 0$ 时有

$$\boldsymbol{J}^2 = -\frac{1}{16}\{\boldsymbol{L}^2(\boldsymbol{B}^2 - 1) - (\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{B})^2\}, \tag{12.8.26}$$

此处 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 由式(12.8.20)给出. 从式(12.8.21)我们得到

$$\boldsymbol{B}^2 = -\left(\boldsymbol{L}^2 + \frac{\mu x^2}{2E} + 1\right) + q^2, \tag{12.8.27}$$

因此

$$\boldsymbol{J}^2 = \frac{1}{16}\left\{\boldsymbol{L}^4 + \frac{\mu x^2}{2E}(\boldsymbol{L}^2 - q^2) + (2 - q^2)\boldsymbol{L}^2\right\}. \tag{12.8.28}$$

将 $\boldsymbol{L}^2$ 代入我们得到 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征值 ρ：

$$\rho = \frac{1}{16}\{l(l+1)^2 - (l_1 + l_1 + 1)^2(l(l+1) - q^2) + (2 - q^2)l(l+1)\}, \tag{12.8.29}$$

用 $l_1 + l_2 = l + p$，得到

$$\rho=-\frac{1}{16}\{[(l+1)(2p+1)+p^2][l(l+1)-q^2]-2l(l+1)\},\qquad(12.8.30)$$

可以证明式(12.8.30)是和式(12.8.17)相互恰合的. 实际上，因为

$$\begin{aligned}l(l+1)-q^2&=(l_1+l_2+p)(l_1+l_2-p+1)-(l_1-l_2)^2\\&=(2l_1-p)(2l_2-p)+l_1+l_2-p\\&=4l_1l_2-2(l_1+l_2)p+l_1+l_2-p+p^2,\end{aligned}$$

以及

$$\begin{aligned}(l+1)(2p+1)+p^2&=2(l_1+l_2-p)p+l_1+l_2+p+p^2+1\\&=l_1+l_2+1+2(l_1+l_2)p-p^2+p,\end{aligned}$$

这样式(12.8.29)就变为

$$\begin{aligned}\rho=&-\frac{1}{16}\{-l_1(l_1+1)-l_2(l_2+1)+2l_1l_2+4(l_1+l_2)l_1l_2\\&+(4l_1l_2-1)[2(l_1+l_2)p-p^2+p]-[2(l_1+l_2)p-p^2+p]^2\\&+2(2l_1+2l_2+1)p-2p^2\}\\=&\frac{1}{16}\{l_1(l_1+1)+l_2(l_2+1)-[2(l_1-p)(l_2-p)-p(p+1)]\\&-4(l_1+l_2)l_1l_2-p(2l_1+2l_2+1-p)[4l_1l_2+2\\&-p(2l_1+2l_2+1-p)]\}\\=&\frac{1}{16}\{l_1(l_1+1)+l_2(l_2+1)-[2(l_1-p)(l_2-p)-p(p+1)]\\&-4(l_1+l_2)l_1l_2-p(2l_1+2l_2+1-p)[4l_1l_2+2-p(2l_1+2l_2+1-p)]\}.\end{aligned}\qquad(12.8.31)$$

这正好是对于 $a^2=b^2=\frac{1}{4}$ 式(12.8.17)所给出的. 显然，当有磁单极存在时 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征值依赖于 q. 去掉一个共同因子 $\frac{1}{16}$，在下面我们给出 $\boldsymbol{J}^2=\rho$ 本征值的例子：

$n=1$, $l=q=0(p=0)$: $\rho=0$

$n=\frac{3}{2}$, $l=q=\frac{1}{2}(p=0)$: $\rho=(l+1)[l(l+1)-q^2]-2l(l+1)=\frac{3}{4}$

$n=2$, $l=1(p=0),0(p=1),q=1$: $\rho=2(l=1),4(l=0)$

$l=1,0;\ q=0$: $\rho=0(l=1),0(l=0)$

$l=\frac{3}{2}(p=0),\frac{1}{2}(p=1);\ q=\frac{3}{2}$: $\rho=\frac{15}{4}\left(l=\frac{3}{2}\right),\frac{37}{4}\left(l=\frac{1}{2}\right)$

$l=\frac{3}{2},\frac{1}{2};\ q=\frac{1}{2}$: $\rho=-\frac{5}{4}\left(l=\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right)$

$n=3$, $l=2(p=0),1(p=1),0(p=2);\ q=2$: $\rho=6(l=2),18(l=1),36(l=0)$

$l=2,1;\ l=1$: $\rho=-3(l=2,l=1)$

$l=2,1,0,q=0$: $\rho=-6(l=2),-10(l=1),0(l=0)$

在结束本节时，我们愿意指出一个有趣的结果. 在前面我们指出过，当 $\boldsymbol{J}$ 满足 Yangian 对易关系时，任意平移 $\boldsymbol{J}\to\lambda\boldsymbol{I}+\boldsymbol{J}$ 将不会改变对易关系. 将这一点用于当前情况并在式(12.8.2)中进行平移，$\boldsymbol{J}'^2$ 的本征值 $\rho\left(\text{在式(12.8.17)中 } b=a=-\frac{1}{4}\right)$是和以下本征值相

联系的

$$J' = FI + J(I = L_1 + L_2), \tag{12.8.32}$$

$$\begin{aligned}\rho' = \rho + \{&2l_1(l_1+1)a + 2l_2(l_2+1)b \\ &+ [2(l_1-p)(l_2-p) - p(p+1)(a+b)]F \\ &+ [l_1(l_1+1) + l_2(l_2+1) + 2(l_1-p)(l_2-p) - p(p+1)]F^2\}.\end{aligned} \tag{12.8.33}$$

另一方面我们有

$$J'^2 = J^2 + 2FI \cdot J + F^2 I^2, \tag{12.8.34}$$

代入式(12.8.2)并用

$$I \cdot J = -\frac{1}{4} L \cdot B, \tag{12.8.35}$$

我们得到

$$J'^2 = J^2 - \frac{1}{2}(L \cdot B)F + F^2 L^2. \tag{12.8.36}$$

注意到

$$\begin{aligned}&2l_1(l_1+1)a + 2l_2(l_2+1)b + [2(l_1-p)(l_2-p) - p(P+1)](a+b) \\ =& -\frac{1}{4}[2l_1(l_1+1) - 2l_2(l_2+1)] = -\frac{1}{2}(l_1-l_2)(l_1+l_2+1),\end{aligned}$$

这样式(12.8.36)就能写作

$$\rho' = \rho - \frac{1}{2}(l_1-l_2)(l_1+l_2+1)F + (l_1+l_2-p)(l_1+l_2-p+1)F^2. \tag{12.8.37}$$

由于磁单极存在,式(12.8.36)给出

$$\rho' = \rho - \frac{1}{2}q\sqrt{-\frac{\mu\kappa^2}{2\epsilon}}F + l(l+1)F^2, \tag{12.8.38}$$

这和式(12.8.37)完全等同. 利用 $l = l_1 + l_2 - p$ 和 $q = |l_1 - l_2|$ 我们再次得到:

$$\epsilon = -\frac{\mu\kappa^2}{2}\frac{1}{(l_1+l_2+1)^2}, \tag{12.8.39}$$

这演示出氢原子能谱不因平移 $J \to J + FI$ 而有所改变.

12.9 Yangian 和 Bell 基

对两个自旋 A 和 B 组成的系统,我们用 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 来表示状态 $|\uparrow\rangle_A|\downarrow\rangle_B$,这样 Bell 基就定义为

$$|\Psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle), \tag{12.9.1}$$

$$|\Phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle \pm |\downarrow\downarrow\rangle), (|\Psi^-\rangle = \Psi_{00}).$$

它们代表最大缠绕态. 在这四个态中, $|\psi^-\rangle$ 在一定意义上是特殊的. 它是系统的自旋单态. 下面我们来证明其他三个态(自旋三重态)可以用 Yangian 算符作用在 $|\Psi^-\rangle$ 上面来生成.

定义 Yangian 算符

$$\boldsymbol{J} = a\boldsymbol{S}_1 + b\boldsymbol{S}_2 - \mathrm{i}\boldsymbol{S}_1 \times \boldsymbol{S}_2, \tag{12.9.2}$$

或写为分量形式

$$\begin{aligned} J_+ &= aS_1^+ + bS_2^+ - (S_1^+ S_2^3 - S_1^3 S_2^+), \\ J_- &= aS_1^- + bS_2^- + (S_1^- S_2^3 - S_1^3 S_2^-), \\ J_3 &= aS_1^3 + bS_2^3 + \frac{1}{2}(S_1^+ S_2^- - S_1^- S_2^+), \end{aligned} \tag{12.9.3}$$

此处 a 和 b 是任意参量，$\boldsymbol{S}_1$ 和 $\boldsymbol{S}_2$ 分别作用在粒子 A 和 B 上面．$J_\pm$ 和直角坐标分量 J_1 和 J_2 的关系是

$$J_\pm = J_1 \pm \mathrm{i}J_2. \tag{12.9.4}$$

将 $J_\pm$ 作用在 $|\Psi^-\rangle$ 上，我们得到

$$(aS_1^+ + bS_2^+)\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = \frac{b-a}{\sqrt{2}}|\uparrow\uparrow\rangle,$$

$$(aS_1^- + bS_2^-)\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = -\frac{b-a}{\sqrt{2}}|\downarrow\downarrow\rangle,$$

$$(S_1^+ S_2^3 - S_1^3 S_2^+)\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{-1}{2}|\uparrow\uparrow\rangle - \frac{1}{2}|\uparrow\uparrow\rangle\right) = -\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\uparrow\rangle,$$

$$(S_1^- S_2^3 - S_1^3 S_2^-)\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{1}{2}|\downarrow\downarrow\rangle - \frac{1}{2}|\downarrow\downarrow\rangle\right) = -\frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\downarrow\rangle,$$

$$J_+ \Psi_{00} = \frac{b-a+1}{\sqrt{2}}|\uparrow\uparrow\rangle,$$

$$J_- \Psi_{00} = \frac{a-b-1}{\sqrt{2}}|\downarrow\downarrow\rangle = -\frac{b-a+1}{\sqrt{2}}|\downarrow\downarrow\rangle,$$

$$\begin{aligned}(aS_1^3 + bS_2^3)\Psi_{00} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\frac{a}{2}|\uparrow\downarrow\rangle + \frac{a}{2}|\downarrow\uparrow\rangle - \frac{b}{2}|\uparrow\downarrow\rangle - \frac{b}{2}|\downarrow\uparrow\rangle\right\}, \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{a-b}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle),\end{aligned}$$

$$\frac{1}{2}(S_1^+ S_2^- - S_1^- S_2^+)\Psi_{00} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(-|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) = -\frac{1}{2\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle),$$

结果为

$$\left.\begin{aligned} J_3\Psi_{00} &= \frac{a-b-1}{2}\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) = -\frac{b-a+1}{2}\Psi^+, \\ J_1\Psi_{00} &= \frac{b-a+1}{2}\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle) = \frac{b-a+1}{2}\Phi^-, \\ J_2\Psi_{00} &= \frac{b-a+1}{2\mathrm{i}}\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) = \frac{b-a+1}{2\mathrm{i}}\Phi^+. \end{aligned}\right\} \tag{12.9.5}$$

如果 $a-b-1\neq 0$，即 $|\Psi^-\rangle$ 不是 $Y(SU(2))$ 的亚表示，我们就有在图(12.5)中下面的路线所代表的情况。

$$\left.\begin{aligned} J_1\,|\Psi^-\rangle &\to |\Phi^-\rangle, \\ J_2\,|\Psi^-\rangle &\to |\Phi^+\rangle, \\ J_3\,|\Psi^-\rangle &\to |\Psi^+\rangle. \end{aligned}\right\} \tag{12.9.6}$$

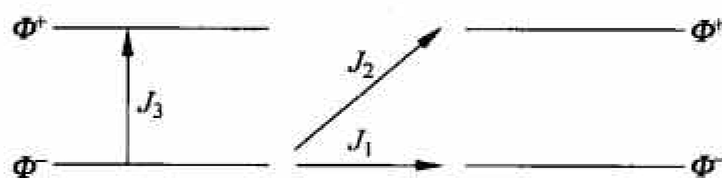


图 12.5 算符 J_1,J_2,J_3 作用于 Bell 基

用文字来说明，就是 $|\Phi^{\pm}\rangle$ 和 $|\Psi^{+}\rangle$ 可以通过将 $\boldsymbol{J}$ 作用在 $|\Psi^{-}\rangle$ 上面生成. 或者

$$\left.\begin{aligned}J_3&=-\lambda\mid\Psi^{+}\rangle\langle\Psi^{-}\mid,\\J_1&=\lambda\mid\Phi^{-}\rangle\langle\Psi^{-}\mid,\\J_2&=-i\lambda\mid\Phi^{+}\rangle\langle\Psi^{-}\mid.\end{aligned}\right\}\tag{12.9.7}$$

从式(12.9.6)和式(12.9.7)可以显然看出式(12.9.3)给出的 $J_{\pm},J_3$ 导致自旋单态和自旋三重态之间的跃迁. 长期以来在电动力学中我们知道这种跃迁可以通过矢量势 $A(\boldsymbol{r},t)$ 的多极展开来产生. 而在这里我们用自旋算符本身构造了提升和降低算符. 这个例子证明 Bell 基可以自然地用 $\boldsymbol{J}$ 来生成，在实际中这可以用某种电磁激发来实现.

12.10 S-波到 P-波超导的转变

通常超导电性(SC)是用 Cooper 对理论描述的，即两个电子形成 S 波配对. 另一方面，也有 Balian[32] 和 Werthamer(BW)提出的 P-波超导理论. 虽然 P-波超导理论已被成功地应用于 ^{3}He[33-35] 的超流性，而非超导性，作为一个练习，我们愿意讨论一下通过哪一类算符我们可以把 S-波超导转变为 P-波超导.

两个自旋 $-\frac{1}{2}$ 粒子的基可以写成下面的形式

$$\mid W\rangle=\sum_{\beta,\gamma=1}^{2}W_{\beta\gamma}\mid\beta\rangle_1\mid\gamma\rangle_2,\tag{12.10.1}$$

此处 $|\beta\rangle_1$ 和 $|\gamma\rangle_2$ 分别表示第 1 个粒子和第 2 个粒子的自旋状态. $|\beta\rangle$ 和 $|\gamma\rangle$ 的正交性给出

$$W_{\beta\gamma}={}_1\langle\beta\mid{}_2\langle\gamma\mid W\rangle=\langle\beta,\gamma\mid W\rangle\tag{12.10.2a}$$

因为 β 和 γ 在自己的空间内分别有指标 1 和 2，$W_{\beta\gamma}$ 的矩阵形式可以用 2×2 矩阵 $\boldsymbol{\Phi}$ 表示：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Phi}(1,1)&=\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix},\boldsymbol{\Phi}(1,2)=\begin{bmatrix}0&1\\0&0\end{bmatrix},\\\boldsymbol{\Phi}(2,1)&=\begin{bmatrix}0&0\\1&0\end{bmatrix},\boldsymbol{\Phi}(2,2)=\begin{bmatrix}0&0\\0&1\end{bmatrix}.\end{aligned}\tag{12.10.2b}$$

将复合算符 A_1B_2 作用在张量态 $|W\rangle$ 上，我们有

$$\begin{aligned}A_1B_2\mid W\rangle=\mid V\rangle&=\sum_{\beta,\nu}W_{\beta\nu}(A_1\mid\beta\rangle_1)(B_2\mid\nu\rangle_2)=\sum_{\sigma,\iota}V_{\sigma\iota}\mid\sigma\rangle_1\mid\iota\rangle_2\\&=\sum_{\beta,\nu,\sigma,\iota}W_{\beta\nu}A_{\sigma\beta}B_{\iota\nu}\mid\sigma\rangle_1\mid\iota\rangle_2\\&=\sum_{\beta,\nu,\sigma,\iota}A_{\sigma\beta}W_{\beta\nu}(\widetilde{B}_{\nu\iota})_{\nu\iota},\end{aligned}\tag{12.10.3}$$

即

$$V_{\sigma\iota}=\sum_{\beta,\nu}A_{\sigma\beta}W_{\beta\nu}(\widetilde{B}_{\nu\iota})_{\nu\iota},\tag{12.10.4}$$

此处$\widetilde{\boldsymbol{B}}$是矩阵$\boldsymbol{B}$的转置.

对于二自旋的情况有

$$I_\alpha=S_1^\alpha\otimes 1+1\otimes S_2^\alpha,\tag{12.10.5}$$

$$J_\alpha=aS_1^\alpha\otimes 1+b1\otimes S_2^\alpha-\mathrm{i}\nu\varepsilon_{\alpha\mu\nu}S_1^\mu\otimes S_2^\nu,\tag{12.10.6}$$

此处$\alpha,\mu,\nu=1,2,3$以及a,b,ν为任意参数.从式(12.10.4)有

$$A_1B_2\mid W\rangle=\sum_{\beta,\nu}(AW\widetilde{B})_{\beta\nu}\mid\beta\rangle_1\mid\nu\rangle_2.\tag{12.10.7}$$

形式上我们可以写,

$$A_1B_2(W)=AW\widetilde{B}.\tag{12.10.8}$$

通过式(12.10.5)～式(12.10.8)我们得到

$$I_\alpha(W)=S^\alpha W+W\widetilde{S}^\alpha,$$

$$J_\alpha(W)=aS^\alpha W+bW\widetilde{S}^\alpha-\frac{\mathrm{i}\nu}{2}\varepsilon_{\alpha\mu\nu}(S^\mu W\widetilde{S}_\nu-S^\nu W\widetilde{S}_\mu).\tag{12.10.9}$$

用式(12.10.2)的符号,单态具有以下形式:

$$\boldsymbol{\varphi}(0,0)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{\Phi}(1,2)-\boldsymbol{\Phi}(2,1))=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&1\\-1&0\end{bmatrix}.\tag{12.10.10}$$

而三重态可以写作

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{\varphi}(1,1)=\boldsymbol{\Phi}(1,1)=\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix},\boldsymbol{\varphi}(1,-1)=\boldsymbol{\Phi}(2,2)=\begin{bmatrix}0&0\\0&1\end{bmatrix},\\&\boldsymbol{\varphi}(1,0)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{\Phi}(1,2)+\boldsymbol{\Phi}(2,1))=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}.\end{aligned}\tag{12.10.11}$$

因此

$$\begin{aligned}J_+(\boldsymbol{\varphi}(0,0))=&\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{a\begin{bmatrix}0&1\\0&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&1\\-1&0\end{bmatrix}+b\begin{bmatrix}0&1\\-1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&0\\1&0\end{bmatrix}\right.\\&-\frac{\nu}{2}\left(\begin{bmatrix}0&1\\0&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&1\\-1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\right.\\&\left.\left.-\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&1\\-1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&0\\1&0\end{bmatrix}\right)\right\}\\=&-\frac{1}{\sqrt{2}}(a-b-\nu)\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix}\\=&-\frac{1}{\sqrt{2}}(a-b-\nu)\boldsymbol{\varphi}(1,1).\end{aligned}\tag{12.10.12}$$

类似地我们有

$$J_-(\boldsymbol{\varphi}(0,0))=\frac{1}{\sqrt{2}}(a-b-\nu)\boldsymbol{\varphi}(1,-1),\tag{12.10.13}$$

$$J_3(\boldsymbol{\varphi}(0,0))=\frac{1}{2}(a-b-\nu)\boldsymbol{\varphi}(1,0).\tag{12.10.14}$$

现在我们转过来讨论设想中的 S-波和 P-波超导的转换. 一个二电子体系应该在交换时处于完全反对称态. 波函数的自旋-角动量部分如下[32]：

S-波：

$$\boldsymbol{\phi}_{J=0,m=0} = Y_{0,0}\boldsymbol{\varphi}(0,0); \tag{12.10.15}$$

P-波(BW)型[32,33]：

$$\boldsymbol{\Psi}_{J=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{3}}(Y_{1,1}\boldsymbol{\varphi}(1,-1) - Y_{1,0}\boldsymbol{\varphi}(1,0) + Y_{1,-1}\boldsymbol{\varphi}(1,1)). \tag{12.10.16}$$

此处 Y_{lm} 是球谐函数.

在动量空间中我们有

$$\begin{aligned} &Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta_k = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\hat{k}_z, \\ &Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta_k e^{\pm i\phi_k} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\hat{k}_\pm, \\ &\hat{k}_\pm = \hat{k}_x \pm i\hat{k}_y. \end{aligned} \tag{12.10.17}$$

式(12.10.15)和式(12.10.16)可以改写为

$$\boldsymbol{\phi}_{J=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & Y_{0,0} \\ -Y_{0,0} & 0 \end{bmatrix}, \tag{12.10.18}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Psi}_{J=0,m=0} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} Y_{1,-1} & -\frac{1}{\sqrt{2}}Y_{1,0} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}Y_{0,0} & Y_{1,1} \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{8\pi}}\begin{bmatrix} \hat{k}_- & -\hat{k}_z \\ -\hat{k}_z & -\hat{k}_+ \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{12.10.19}$$

用式(12.10.12)我们得到

$$\left.\begin{aligned} &\hat{k}_- J_+ (Y_{0,0}\boldsymbol{\varphi}(0,0)) = \hat{k}_- Y_{0,0}J_+ (\boldsymbol{\varphi}(0,0)) = \sqrt{\frac{1}{8\pi}}(b-a+\nu)\begin{bmatrix} \hat{k}_- & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ &\hat{k}_+ J_- (Y_{0,0}\boldsymbol{\varphi}(0,0)) = \sqrt{\frac{1}{8\pi}}(b-a+\nu)\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\hat{k}_+ \end{bmatrix}, \\ &\hat{k}_3 J_3 (Y_{0,0}\boldsymbol{\varphi}(0,0)) = \sqrt{\frac{1}{8\pi}}(b-a+\nu)\begin{bmatrix} 0 & -\hat{k}_+ \\ -\hat{k}_z & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}\right\} \tag{12.10.20}$$

式(12.10.20)可以总结为

$$(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{J})\boldsymbol{\phi}_{J=0,m=0} = (b-a+\nu)\boldsymbol{\Psi}_{J=0,m=0}. \tag{12.10.21}$$

我们愿意强调 BW 波函数 $\boldsymbol{\Psi}_{J=0,m=0}$ 最初是用来描述^{3}He 超流性的，现在我们借用来描述超导性. 如果将来发现了 P-波超导，并且发现了存在从 S-波到 P-波超导的弱的转变，则这个转变是由 Yangian 算符的作用描述的.

当 $b-a=-1$(通过设定 $\nu=1$)，从 S-波到 P-波超导的转变是禁戒的，而对 $b-a=1$，转

变是允许的.我们看到不同的参数值可以诱导不同的转变体制.对参数的某些特殊值转换是单向的,这是由Yangian算符诱导的转换的不可逆性所决定的.我们知道Lie代数作用于线性空间,而Yangian算符作用于量子张量空间,后者包括了不同线性空间的相互作用.如何能够在物理上控制参数a和b是值得进一步研究的.

12.11 量子代数

在12.2节中我们看到RTT关系式(12.2.3)在量子可积系统的研究中起重要作用.缔合性式(12.3.2)导致了YBE.在那里我们只考虑了YBE最简单的有理解:$\check{\boldsymbol{R}}(u)=\boldsymbol{I}+u\boldsymbol{P}$,其中$\boldsymbol{P}$代表排列.实际上对$\check{\boldsymbol{R}}(u)$有三种解:有理解,三角解和椭圆解[35],对于$\check{\boldsymbol{R}}(u)$的一个给定的解应该有由RTT关系给出的相应代数结构.为方便起见我们将RTT关系写作下面形式

$$\check{\boldsymbol{R}}(xy^{-1})[\boldsymbol{T}(x)\otimes\boldsymbol{T}(y)]=[\boldsymbol{T}(y)\otimes\boldsymbol{T}(x)]\check{\boldsymbol{R}}(xy^{-1}),\tag{12.11.1}$$

在这里谱参数$x=e^u$和$y=e^v$用来代替原来的u和v.当$u,v\to\infty$以及$u-v\to\infty$时我们有

$$\check{\boldsymbol{R}}(x\to\infty)=\boldsymbol{S},\check{\boldsymbol{R}}(x=1)=\boldsymbol{I}(\check{\boldsymbol{R}}=\boldsymbol{P}v),\tag{12.11.2}$$

$$\lim_{x\to\infty}\boldsymbol{T}(x)=\boldsymbol{T}=\|T_{ab}\|.\tag{12.11.3}$$

式(12.11.1)的渐近形式为(对重复指标求和)

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{T}\otimes\boldsymbol{T})=(\boldsymbol{T}\otimes\boldsymbol{T})\boldsymbol{S}\tag{12.11.4}$$

或

$$S_{ij,mn}(T\otimes T)_{mn,kl}=(T\otimes T)_{ij,mn}S_{mn,kl}.\tag{12.11.5}$$

上面我们用到了

$$(A\otimes B)_{mn,kl}=A_{mk}B_{nl},$$

式(12.11.5)的分量形式是

$$S_{ij,mn}T_{mk}T_{nl}=T_{im}T_{jn}S_{mn,kl},\tag{12.11.6}$$

此处对$SU(2)$辅助空间$i,j,\cdots=1,2$,$\boldsymbol{S}$满足

$$S_{ij,ml}S_{nt,lk}S_{vs,mn}=S_{lm,jk}S_{vn,il}S_{st,nm},\tag{12.11.7}$$

这里有三个入指标i,j,k和三个出指标v,s,t.式(12.11.7)被称为辫子条件[37~39].

容易验证,式(12.11.7)的一个简单解是:

$$\boldsymbol{S}=\begin{matrix} & \begin{matrix}11 & 12 & 21 & 22\end{matrix} \\ \begin{matrix}11\\12\\21\\22\end{matrix} & \begin{bmatrix} q & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 1 & q-q^{-1} & 0\\ 0 & 0 & 0 & q\end{bmatrix}\end{matrix}\tag{12.11.8}$$

此处矩阵的列用i,j标记而行用m,l标记.在解式(12.11.7)时,在$\boldsymbol{S}$中允许有一个自由参量q.当$q=1$时有$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{P}$,因此$\boldsymbol{S}$仅是排列$\boldsymbol{P}$的变形.

有了辫子群式(12.11.8)的解就容易得到YBE的解

$$\check{R}_{ij,ml}(x)\check{R}_{nt,lk}(xy)\check{R}_{vs,mn}(y)=\check{R}_{lm,jk}(y)\check{R}_{vn,il}(xy)\check{R}_{st,nm}(x). \qquad (12.11.9)$$

直接验证得出

$$\check{\boldsymbol{R}}(x)=\begin{bmatrix}\sinh(u+v) & 0 & 0 & 0\\ 0 & \sinh u & \sinh \nu & 0\\ 0 & \sinh v & \sinh u & 0\\ 0 & 0 & 0 & \sinh(u+v)\end{bmatrix}=xs-x^{-1}s^{-1} \qquad (12.11.10)$$

满足式(12.11.9)，此处 $x=e^u$ 以及 $q=e^v$. 我们看到在 $\boldsymbol{S}$ 中有一个变形参数 q，而在$\check{\boldsymbol{R}}(x)$中在 q 之外还有动力学参数 x. 当 $u,v\to0$ 时从式(12.11.10)得到

$$\check{\boldsymbol{R}}(x)\quad|_{u\to0,v\to0}\quad=u\boldsymbol{I}+\nu\boldsymbol{P}=u(\boldsymbol{I}+\frac{v}{u}\boldsymbol{P}), \qquad (12.11.11)$$

即$\frac{v}{u}$和式(12.1.12)中的最简单有理形式$\check{\boldsymbol{R}}(u)$相比起着类似作用，因为式(12.11.9)容许任意共同因子的存在.

式(12.11.10)被称为 YBE 的三角解，对 $x=e^{iu}$ 和 $q=e^{iv}$ 时仍然成立.

有了式(12.11.8)给出的 $\boldsymbol{S}$(4×4 矩阵)作为工具，我们来求满足式(12.11.6)的容许的 $\boldsymbol{T}$(2×2 矩阵). 用完在式(12.11.6)中的指标 $i,j,\cdots=1,2$，例如，对 $i=1,j=2,k=l=1$，在式的左方只有不为零的 $S_{12,21}=1$，而在右方只有 $S_{11,11}=q$，因此哑标只能是 $m=2,n=1$. 这导致

$$T_{21}T_{11}=qT_{11}T_{21}. \qquad (12.11.12)$$

将 $\boldsymbol{T}$ 写作

$$\boldsymbol{T}=\begin{bmatrix}a & b\\ c & d\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}T_{11} & T_{12}\\ T_{21} & T_{22}\end{bmatrix}, \qquad (12.11.13)$$

式(12.11.12)就能写为 $ac=q^{-1}ca$. 我们得到

$$\begin{aligned}&ab=q^{-1}ba, && ac=q^{-1}ca,\ bc=cb,\\ &bd=q^{-1}db, && cd=q^{-1}dc,\\ &ad-da=(q^{-1}-q)bc,\end{aligned} \qquad (12.11.14)$$

最后的关系能改写为

$$ad-q^{-1}bc=da-qbc\equiv\det q\boldsymbol{T}. \qquad (12.11.15a)$$

它是 $\det\boldsymbol{T}$ 的 q-形变形式.

$\det q\boldsymbol{T}$ 和 a,b,c 及 d 对易，例如，由于式(12.11.15)我们得到

$$\begin{aligned}[\det q\boldsymbol{T},a]&=(ad-q^{-1}bc)a-a(da-qbc)\\ &=qabc-q^{-1}bca=0,\end{aligned} \qquad (12.11.15b)$$

此处我们用了 $bca=q^2abc$. 所以，$\det q\boldsymbol{T}$ 是由 a,b,c 和 d 所形成的代数的中心. 以下对易性

$$[\det q\boldsymbol{T},A]=0,\quad A=a,b,c,d \qquad (12.11.16)$$

允许我们得到 $\boldsymbol{T}$ 的逆：

$$\boldsymbol{T}^{-1}=(\det q\boldsymbol{T})^{-1}\begin{bmatrix}d & -qb\\ -q^{-1}c & a\end{bmatrix}. \qquad (12.11.17)$$

由于历史原因，集合 $T=\{a,b,c,d\}$被称为与 $SL(2)$相关的量子群. 实际上它不是在通常意义的群论中所定义的群. 实际上，它属于一个 q-变形的 Hopf 代数.

式(12.11.14)的最简单的选择是

$$\boldsymbol{T}=\begin{bmatrix} a & b \\ 0 & a^{-1} \end{bmatrix}, \tag{12.11.18}$$

在此情况下仅存的对易关系是

$$ba = qab, \tag{12.11.19}$$

它可以通过下面二式来实现

$$b = \exp\{\mathrm{i}\alpha\hat{p}\},$$
$$a = \exp\{\mathrm{i}\beta x\}.$$

由于$[\hat{p},x]=-\mathrm{i}h$,这导致

$$q = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\beta h}.$$

这个例子没有给出什么新东西,它只是和$\hat{p}$与x的对易关系等价而已.

和 SL(2)相关的量子群式(12.11.14)由 YBE 的解通过式(12.11.6)在$x\to\infty$时的渐近行为给出,即

$$\check{\boldsymbol{R}}(x) = x\boldsymbol{S} - x^{-1}\boldsymbol{S}. \tag{12.11.20}$$

现在将式(12.11.20)代入式(12.11.1)并假定$\boldsymbol{T}(x)$有以下形式:

$$\boldsymbol{T}(x) = x\boldsymbol{L}^{+}+x\boldsymbol{L}^{-},\boldsymbol{L}^{\sigma} = \| (\boldsymbol{L}^{\sigma})_{ij} \| \ (\sigma=\pm,i,j=1,2),$$

我们就得到有名的 Reshetikhin-Faddeev-Takhtajan(RFT)关系[38]

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{L}^{\pm}\otimes\boldsymbol{L}^{\pm}) = (\boldsymbol{L}^{\pm}\otimes\boldsymbol{L}^{\pm})\boldsymbol{S}, \tag{12.11.21}$$

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{L}^{+}\otimes\boldsymbol{L}^{-}) = (\boldsymbol{L}^{-}\otimes\boldsymbol{L}^{+})\boldsymbol{S}. \tag{12.11.22}$$

此处$\boldsymbol{S}$由式(12.11.8)给出,在代入式(12.11.21)~式(12.11.22)后导致

$$L_{12}^{\sigma}L_{12}^{\sigma} = 0, \tag{12.11.23}$$

$$[L_{ii}^{\sigma},L_{jj}^{\sigma}] = 0(i,j=1,2,\sigma=\pm\phi), \tag{12.11.24}$$

$$L_{ii}^{\sigma}L_{12}^{+} = q^{+\sigma\varepsilon(i)}L_{12}^{+}L_{ii}^{\sigma}, \tag{12.11.25}$$

$$L_{ii}^{\sigma}L_{21}^{-} = q^{-\sigma\varepsilon(i)}L_{21}^{-}L_{ii}^{\sigma}, \tag{12.11.26}$$

$$[L_{12}^{+},L_{21}^{-}] = (q-q^{-1})(L_{22}^{-}L_{11}^{+}-L_{22}^{+}L_{11}^{-}), \tag{12.11.27}$$

$$\varepsilon(1)=-1,\ \varepsilon(2)=+1.$$

此处对重复指标不求和.

从式(12.11.23)得到

$$\boldsymbol{L}_{+}=\begin{bmatrix} L_{11}^{+} & L_{12}^{+} \\ 0 & L_{22}^{+} \end{bmatrix},\boldsymbol{L}_{-}=\begin{bmatrix} L_{11}^{-} & 0 \\ L_{21}^{-} & L_{22}^{-} \end{bmatrix}. \tag{12.11.28}$$

式(12.11.24)指明$\boldsymbol{L}_{\pm}$的对角元是对易的.满足式(12.11.23)~式(12.11.28)的$\boldsymbol{L}_{\pm}$应该具有以下的形式:

$$\boldsymbol{L}_{-}=\begin{bmatrix} k & (Q-Q^{-1})X_{+} \\ 0 & K^{-1} \end{bmatrix},\boldsymbol{L}_{+}=\begin{bmatrix} K^{-1} & 0 \\ -(Q-Q^{-1})X_{-} & K \end{bmatrix}. \tag{12.11.29}$$

此处$Q=q^{-1}$以及K与$X_{\pm}$满足

$$KX_{\pm}K^{-1} = Q^{\pm1}X_{\pm}, \tag{12.11.30}$$

$$[X^{+},X^{-}] = \frac{K^{2}-K^{-2}}{Q-Q^{-1}}. \tag{12.11.31}$$

定义 $K=Q^{X_3}=e^{\gamma X_3}$，于是有

$$[X_+,X_-]=\frac{\sinh(2\gamma X_3)}{\sinh 2\gamma}. \tag{12.11.32}$$

式(12.11.30)和式(12.11.31)所定义的代数和余乘积

$$\begin{aligned}\Delta(K)&=1\otimes K+K\otimes 1,\\ \Delta(X_\pm)&=X_\pm\otimes K+K^{-1}\otimes X_\pm,\end{aligned} \tag{12.11.33}$$

和对映(antipode) S

$$S(1)=1,S(K)=K^{-1},S(X_\pm)=-Q^{\pm1}X_\pm, \tag{12.11.34}$$

以及协单位元(co-unit)

$$\varepsilon(1)=1,\varepsilon(K)=\varepsilon(X_\pm)=0, \tag{12.11.35}$$

形成与 $SL(2)$ 相联系的量子代数. 式(12.11.30)～式(12.11.35)是首先由 M. Jimbo[40] 提出的，同时 L. D. Faddeev 也在一篇未发表的论文中提出过类似的概念. 实际上，V. G. Drinfeld[6,7] 还有更普遍的满足式(12.11.21)和式(12.11.22)的 $L_\pm$ 形式. 更多的发展可以在文献[17]中找到.

12.12 双频谐振子与量子代数对易关系

在杨振宁-Baxter 系统文献中，Yangian 和量子代数(quantum algebra)都属于量子群结构. 以下着重从量子力学角度研究量子代数简单形式的物理意义.

考虑谐振子体系，并删去零点振动能，其二次量子化形式的 Hamilton 量是

$$H_0=\omega_1 a^\dagger a+\omega_2 b^\dagger b, \tag{12.12.1}$$

$a^\dagger,a$ 和 $b^\dagger,b$ 分别是频率为 ω_1 和 ω_2 的振子的产生及消灭算符，满足对易关系

$$[a,a^\dagger]=1,\qquad [b,b^\dagger]=1, \tag{12.12.2}$$

而 a 与 b 是独立的，a 及 $a^\dagger$ 与任一个 $b,b^\dagger$ 对易. 二次量子化 ψ 算符及其共轭是

$$\boldsymbol{\psi}=\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\psi}^\dagger=(a^\dagger,b^\dagger). \tag{12.12.3}$$

H 可以写为

$$H_0=\boldsymbol{\psi}^\dagger\begin{bmatrix}\omega_1 & 0\\ 0 & \omega_2\end{bmatrix}\boldsymbol{\psi}=(\omega_1\omega_2)^{1/2}\,\boldsymbol{\psi}^\dagger\begin{bmatrix}q^{1/2} & 0\\ 0 & Q^{-1/2}\end{bmatrix}\boldsymbol{\psi}, \tag{12.12.4}$$

其中

$$q=\omega_1/\omega_2.$$

若引入相互作用(如令粒子带电，置于共振光场内)则可产生跃迁. $S^+=a^\dagger b,S^-=b^\dagger a$ 是跃迁算符. 如用 $\boldsymbol{\psi}$ 及 $\boldsymbol{\psi}^\dagger$ 表示，它们是

$$\left.\begin{aligned}S^+&=\boldsymbol{\psi}^\dagger\boldsymbol{X}^+\boldsymbol{\psi},\\ S^-&=\boldsymbol{\psi}^\dagger\boldsymbol{X}^-\boldsymbol{\psi},\end{aligned}\right\} \tag{12.12.5}$$

其中

$$\boldsymbol{X}^+=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{X}^-=\begin{bmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{bmatrix}. \tag{12.12.6}$$

这显然是熟知的 σ^+ 和 σ^-. 我们引人新记号的目的是要建造另一组代数生成元 $\boldsymbol{K},\boldsymbol{X}^+,\boldsymbol{X}^-$.

另一个生成元是

$$\boldsymbol{K}=\begin{bmatrix} q^{1/2} & 0 \\ 0 & q^{-1/2} \end{bmatrix}, \tag{12.12.7}$$

与它有关的是：

$$\left.\begin{aligned} &\boldsymbol{K}^{-1}=\begin{bmatrix} q^{-1/2} & 0 \\ 0 & q^{1/2} \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{K}^{2}=\begin{bmatrix} q & 0 \\ 0 & q^{-1} \end{bmatrix}, \boldsymbol{K}^{-2}=\begin{bmatrix} q^{-1} & 0 \\ 0 & q \end{bmatrix}, \\ &2\boldsymbol{X}_3=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}=\frac{\boldsymbol{K}^2-\boldsymbol{K}^{-2}}{q-q^{-1}}. \end{aligned}\right\} \tag{12.12.8}$$

此时可以将 H_0 写作

$$H_0=(\omega_1\omega_2)^{1/2}\psi^{\dagger}\boldsymbol{K}\psi. \tag{12.12.9}$$

用熟知的 σ^+，σ^- 与 σ_3 的对易关系可以写出 $\boldsymbol{X}^+$，$\boldsymbol{X}^-$，$\boldsymbol{X}_3$ 的对易关系：

$$\left.\begin{aligned} &[\boldsymbol{X}_3,\boldsymbol{X}^{\pm}]=\pm\boldsymbol{X}^{\pm}, \\ &[\boldsymbol{X}^+,\boldsymbol{X}^-]=\frac{\boldsymbol{K}^2-\boldsymbol{K}^{-2}}{q-q^{-1}}. \end{aligned}\right\} \tag{12.12.10}$$

上面第一式还不是所需的，要把 $\boldsymbol{X}_3$ 换成 $\boldsymbol{K}$. 为此，改写 $q=\mathrm{e}^{\gamma}$，则有

$$\boldsymbol{K}=\begin{bmatrix} \mathrm{e}^{\gamma/2} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-\gamma/2} \end{bmatrix}=\mathrm{e}^{\gamma\boldsymbol{X}_3}=q^{\boldsymbol{X}_3}. \tag{12.12.11}$$

计算 $\boldsymbol{K}\boldsymbol{X}^{\pm}\boldsymbol{K}^{-1}$：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{K}\boldsymbol{X}^{\pm}\boldsymbol{K}^{-1} &= \left(1+\gamma\boldsymbol{X}_3+\frac{1}{2!}\gamma^2\boldsymbol{X}_3^2+\cdots\right)\boldsymbol{X}^{\pm}\left(1-\gamma\boldsymbol{X}_3+\frac{1}{2!}\gamma^2\boldsymbol{X}_3^2-\cdots\right) \\ &= \boldsymbol{X}^{\pm}+\gamma[\boldsymbol{X}_3,\boldsymbol{X}^{\pm}]-\frac{1}{2}\gamma^2\boldsymbol{X}_3[\boldsymbol{X}^{\pm},\boldsymbol{X}_3]-\frac{1}{2}\gamma^2[\boldsymbol{X}_3,\boldsymbol{X}^{\pm}]\boldsymbol{X}_3+\cdots \\ &= \boldsymbol{X}^{\pm}\pm\gamma\boldsymbol{X}^{\pm}+\frac{1}{2}\gamma^2[\boldsymbol{X}_3,[\boldsymbol{X}_3,\boldsymbol{X}^{\pm}]]\pm\cdots \\ &= \left(1\pm\gamma+\frac{1}{2}\gamma^2\pm\cdots\right)\boldsymbol{X}^{\pm} \\ &= \mathrm{e}^{\pm\gamma}\boldsymbol{X}^{\pm}=q^{\pm 1}\boldsymbol{X}^{\pm}, \end{aligned}$$

在式(12.12.11)的定义下，它与式(12.12.10)的第一式是等价的，它与式(12.12.10)一起被称为量子代数对易关系，即

$$\left.\begin{aligned} &\boldsymbol{K}\boldsymbol{X}^{\pm}\boldsymbol{K}^{-1}=q^{\pm 1}\boldsymbol{X}^{\pm}, \\ &[\boldsymbol{X}^+,\boldsymbol{X}^-]=\frac{\boldsymbol{K}^2-\boldsymbol{K}^{-2}}{q-q^{-1}}=\frac{q^{2\boldsymbol{X}_3}-q^{-2\boldsymbol{X}_3}}{q-q^{-1}}\equiv[2\boldsymbol{X}_3]_q. \end{aligned}\right\} \tag{12.12.12}$$

这个量子代数是与 $SU(2)$ 联系的. $\boldsymbol{K}$ 通过式(12.12.11)与 $\boldsymbol{X}_3$ 相联系，而 $\boldsymbol{X}^+$，$\boldsymbol{X}^-$，$\boldsymbol{X}_3$ 是 $SU(2)$ 李代数. 以上的作法似乎是避简趋繁，结果并未使 $SU(2)$ 代数有新的进展. 实际上是从一个简单的例子做起，说明如果选 $\boldsymbol{X}^+$，$\boldsymbol{X}^-$（即 σ^+，σ^-）与 $\boldsymbol{K}$ 作为基底，则原有的 $SU(2)$ 对易关系就成为"q 变形"的形式(式(12.12.12). 式中 $[2\boldsymbol{X}_3]_q$ 即意味着 $2\boldsymbol{X}_3$ 的 q 变形. 对 $\boldsymbol{X}^{\pm}$，$\boldsymbol{K}$ 用了 $SU(2)$ 的 2×2 矩阵表示，变形与不变形没有差别，但对 $SU(2)$ 的一般表示，式(12.12.12)与 $SU(2)$ 有本质的差别. 它仅当 $q\to 1$ 时才回到 $SU(2)$ 代数，这是因为

$$[\boldsymbol{X}^+,\boldsymbol{X}^-]=\frac{q^{2\boldsymbol{X}_3}-q^{-2\boldsymbol{X}_3}}{q-q^{-1}}=\frac{\sinh 2\gamma\boldsymbol{X}_3}{\sinh\gamma},$$

而当 $\gamma\to 0$，即 $q\to 1$ 时有通常的

$$[\boldsymbol{X}^+,\boldsymbol{X}^-]=2\boldsymbol{X}_3.$$

以上的例子是平凡的，但得到的关系(式(12.12.12))却是普遍的，它揭示了"q 变形"的实质问题.

对式(12.12.12)，第二式可以写成二次量子化形式. 由于 $[\psi_\alpha,\psi_\beta^\dagger]=\delta_{\alpha\beta}$，则有

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{\psi}^\dagger\boldsymbol{X}^+\boldsymbol{\psi},\boldsymbol{\psi}^\dagger\boldsymbol{X}^-\boldsymbol{\psi}]&=(X^+)_{\alpha\beta}(X^-)_{\sigma\tau}[\psi_\alpha^\dagger\psi_\beta,\psi_\sigma^\dagger\psi_\tau]\\&=(X^+)_{\alpha\beta}(X^-)_{\sigma\tau}(\psi_\alpha^\dagger[\psi_\beta,\psi_\sigma^\dagger]\psi_\tau+\psi_\sigma^\dagger[\psi_\alpha^\dagger,\psi_\tau]\psi_\beta)\\&=\psi_\alpha^\dagger[X^+,X^-]_{\alpha\tau}\psi_\tau\\&=\boldsymbol{\psi}^\dagger\frac{\boldsymbol{K}^2-\boldsymbol{K}^{-2}}{q-q^{-1}}\boldsymbol{\psi}\\&=\boldsymbol{\psi}^\dagger[2\boldsymbol{X}_3]_q\boldsymbol{\psi}.\end{aligned}\tag{12.12.13}$$

但对式(12.12.12)中第一式这样做却有困难，因为一般而言，

$$\boldsymbol{\psi}^\dagger\boldsymbol{K}\boldsymbol{\psi}=\boldsymbol{\psi}^\dagger e^{\gamma X_3}\boldsymbol{\psi}\neq e^{\gamma\boldsymbol{\psi}^\dagger X_3\boldsymbol{\psi}}.$$

对量子代数也应引入余乘法. 对任意算符 A 与 B 应有

$$\Delta(AB)=\Delta(A)\Delta(B).$$

但余乘法的本身是什么才能使式(12.12.12)自洽呢? 神保(M. Jimbo)给出定义[1]：

$$\Delta(\boldsymbol{K})=\boldsymbol{K}\otimes\boldsymbol{K},\quad \Delta(\boldsymbol{K}^{-1})=\boldsymbol{K}^{-1}\otimes\boldsymbol{K}^{-1},\tag{12.12.14}$$

$$\Delta(\boldsymbol{X}^\pm)=\boldsymbol{K}\otimes\boldsymbol{X}^\pm+\boldsymbol{X}^\pm\otimes\boldsymbol{K}^{-1}.\tag{12.12.15}$$

将 Δ 作用于式(12.12.12)的第一式：

$$\begin{aligned}\Delta(\boldsymbol{K}\boldsymbol{X}^\pm)&=\Delta(\boldsymbol{K})\Delta(\boldsymbol{X}^\pm)=(\boldsymbol{K}\otimes\boldsymbol{K})(\boldsymbol{K}\otimes\boldsymbol{X}^\pm+\boldsymbol{X}^\pm\otimes\boldsymbol{K}^{-1})\\&=\boldsymbol{K}^2\otimes\boldsymbol{K}\boldsymbol{X}^\pm+\boldsymbol{K}\boldsymbol{X}^\pm\otimes\boldsymbol{I},\\\Delta(\boldsymbol{X}^\pm\boldsymbol{K})&=\Delta(\boldsymbol{X}^\pm)\Delta(\boldsymbol{K})=(\boldsymbol{K}\otimes\boldsymbol{X}^\pm+\boldsymbol{X}^\pm\otimes\boldsymbol{K}^{-1})(\boldsymbol{K}\otimes\boldsymbol{K})\\&=\boldsymbol{K}^2\otimes\boldsymbol{X}^\pm\boldsymbol{K}+\boldsymbol{X}^\pm\boldsymbol{K}\otimes\boldsymbol{I}\end{aligned}$$

将两者相比较，由于 $\boldsymbol{K}\boldsymbol{X}^\pm=q^\pm\boldsymbol{X}^\pm\boldsymbol{K}$，故有

$$\Delta(\boldsymbol{K}\boldsymbol{X}^\pm)=q^\pm\Delta(\boldsymbol{X}^\pm\boldsymbol{K}).$$

同理可证

$$\begin{aligned}\Delta([\boldsymbol{X}^+,\boldsymbol{X}^-])&=\Delta(\boldsymbol{X}^+)\Delta(\boldsymbol{X}^-)-\Delta(\boldsymbol{X}^-)\Delta(\boldsymbol{X}^+)\\&=\frac{1}{q-q^{-1}}(\Delta(\boldsymbol{K}^2)-\Delta(\boldsymbol{K}^{-2})).\end{aligned}$$

因此式(12.12.12)对余乘法是自洽的.

量子代数属于一个更大范畴的 Hopf 代数，关于它更广泛的性质可以参阅文献[12].

12.13 相干态平移算符与量子代数

考虑电子在 xy 平面运动，在 z 方向有均匀恒定磁场 B_0，Hamilton 量为(设 $\hbar=c=1$，电子电荷为 $-e$)

$$H=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})^2\equiv\frac{1}{2m}\boldsymbol{\pi}^2,\tag{12.13.1}$$

其中

$$\boldsymbol{p} = (-\mathrm{i}\partial_x, -\mathrm{i}\partial_y), \quad \boldsymbol{A} = (A_x, A_y),$$
$$\partial_x A_y - \partial_y A_x = B_0.$$

引入

$$\pi^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\pi_x \pm \mathrm{i}\pi_y), \tag{12.13.2}$$

有对易关系

$$[\pi^-, \pi^+] = eB_0. \tag{12.13.3}$$

在 xy 平面上的幺正平移算符是

$$U(\alpha) = \mathrm{e}^{\alpha\pi^+ - \alpha^*\pi^-}, \tag{12.13.4}$$

此处 α 为一复数，其实部与虚部表征在 xy 平面上平移的坐标. 平移算符（式(12.13.4)）也与相干态有关（参阅本书第 4 章 4.1 节）. 如定义 Bose 子产生与消灭算符：

$$b^{\dagger} = \pi^+ \Big/ \sqrt{eB_0}, \qquad b = \pi^- \Big/ \sqrt{eB_0},$$

有

$$[b, b^{\dagger}] = 1.$$

将 $U(\alpha)$ 作用于 Bose 子真空态 $|0\rangle$ 时，有

$$U(\alpha) \mid 0\rangle = \mathrm{e}^{\alpha\pi^+} \mid 0\rangle \equiv \mid \alpha\rangle,$$

得到相干态 $|\alpha\rangle$.

考虑在 xy 平面上相继进行以 α 和 β 表征的两次平移，一次是 $U(\alpha)U(\beta)$，一次是 $U(\beta)U(\alpha)$. 由于有磁场的存在，这两次平移会有不同效果. 要用 Baker-Campbell-Hausdorff 公式的特例：

$$\mathrm{e}^A\mathrm{e}^B = \exp\left(A + B + \frac{1}{2}[A, B]\right),$$

适用条件为 $[A,[A,B]]=[B,[A,B]]=0$. 先计算对易子

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}[\alpha\pi^+ - \alpha^*\pi^-, \beta\pi^+ - \beta^*\pi^-] &= -\mathrm{i}eB_0(\mathrm{Re}\alpha\mathrm{Im}\beta - \mathrm{Im}\alpha\mathrm{Re}\beta)\\ &= -\mathrm{i}eB_0 \cdot (\text{矢量 } \boldsymbol{\alpha} \text{ 与 } \boldsymbol{\beta} \text{ 所张平行四边形面积})\\ &= -\mathrm{i}e\Phi = -\mathrm{i}2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0},\end{aligned}$$

其中 Φ 是通过面积的磁通量，磁通量子 $\Phi_0 = \frac{2\pi}{e}$. 因此得到 Heisenberg-Weyl 关系：

$$U(\alpha)U(\beta) = q^2 U(\beta)U(\alpha), \tag{12.13.5}$$

$$q = \exp\left(-\mathrm{i}2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right). \tag{12.13.6}$$

如磁通量 Φ 与磁通量子 Φ_0 之比为 P/Q，其中 P,Q 为互质素数，则

$$q^Q = 1.$$

从 $U(\alpha)$ 定义可知

$$U(-\alpha) = (U(\alpha))^{-1}. \tag{12.13.7}$$

引入算符

$$\left.\begin{aligned} X^+ &= \frac{1}{q-q^{-1}}(U(-\alpha)+U((-\beta)), \\ X^- &= \frac{1}{q-q^{-1}}(U(\alpha)+U(\beta)), \\ q^{-1}K^2 &= U(-\alpha)U(\beta), \\ qK^{-2} &= U(-\beta)U(\alpha), \end{aligned}\right\} \tag{12.13.8}$$

则根据式(12.13.5)及式(12.13.7)有

$$\left.\begin{aligned} [X^+, X^-] &= \frac{K^2-K^{-2}}{q-q^{-1}}, \\ KX^\pm K^{-1} &= q^{\pm 1}X^\pm, \end{aligned}\right\} \tag{12.13.9}$$

正是量子代数对易关系(式(12.12.12)). 只要幺正算符 U 满足 Heisenberg-Weyl 关系(式(12.13.5)),便可通过式(12.13.8)定义($X^\pm, K$)成为与 $SL(2)$ 相关的量子代数的生成元. 式(12.13.5)也有其他的实现,例如磁平移算符:

$$t(\boldsymbol{a}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\Pi}\cdot\boldsymbol{a}}, \tag{12.13.10}$$

其中

$$\boldsymbol{\Pi} = \boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A} + e\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{B}, \tag{12.13.11}$$

则仍有

$$t(\boldsymbol{a})t(\boldsymbol{b}) = \exp\left(-\mathrm{i}2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)t(\boldsymbol{b})t(\boldsymbol{a}). \tag{12.13.12}$$

直接计算给出

$$[H, \boldsymbol{\Pi}] = 0, \tag{12.13.13}$$

亦即

$$[H, t(\boldsymbol{a})] = 0. \tag{12.13.14}$$

同样,按式(12.13.8)以 t 代替 U 定义 $X^\pm$ 及 K,也得量子代数生成元,并有[53,54]

$$[H, X^\pm] = [H, K] = 0, \tag{12.13.15}$$

即 Hamilton 量与量子代数的生成元对易,或者说 H 具有量子代数对称性. 上面式(12.13.8)与式(12.13.9)等价依赖 $\boldsymbol{\alpha}$ 与 $\boldsymbol{\beta}$ 所围的面积,当该平面对基本平移具有周期性时,q 由元胞决定,这时对应周期网状结构(式(12.13.9))有明确的定义.

有了以上准备,我们来讨论 Hofstadter 模型的量子代数诠释[42].

考虑在 xy 平面格点上运动的电子,有常数磁场 $\boldsymbol{B}$ 沿 z 方向. 电子可以从一个格点跃向其近邻. Hamilton 量是

$$H = \sum_{\langle n,m\rangle}\exp\left[\mathrm{i}\,\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{m})\right]c_n^\dagger c_m, \tag{12.13.16}$$

$\langle n,m\rangle$表示 n,m 格点是近邻. 跳跃幅 $t_{n,m}$ 设为 1. $\frac{1}{2}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{m}$ 代表 $\boldsymbol{n}$ 与 $\boldsymbol{m}$ 在坐标原点所夹三角形的面积,$\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{m})$是穿过三角形的磁通量,而将它对所有格点求和,就是总磁通量 Φ:

$$\sum_{\langle n,m\rangle}\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{m}) = \Phi. \tag{12.13.17}$$

格点 j 上有一个电子的状态$|j\rangle$是

$$|j\rangle = c_j^\dagger|0\rangle, \tag{12.13.18}$$

令

$$A_{n,m} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{m}), \tag{12.13.19}$$

并定义平移算符

$$T_{\mu}(\boldsymbol{j})\exp(\mathrm{i}A_{j,j+\mu}) \mid \boldsymbol{j}\rangle\langle \boldsymbol{j}+\boldsymbol{\mu}\mid, \tag{12.13.20}$$

$$T_{\mu} = \sum_{j} T_{\mu}(\boldsymbol{j}) = \sum_{j}\exp(\mathrm{i}A_{j,j+\mu}) \mid \boldsymbol{j}\rangle\langle \boldsymbol{j}+\boldsymbol{\mu}\mid. \tag{12.13.21}$$

计算两次平移 $\boldsymbol{n},\boldsymbol{m}$ 次序不同的区别，有

$$\begin{aligned} T_n T_m &= \sum_{j,k}\exp[\mathrm{i}(A_{j,j+n} + A_{k,k+m})] \mid \boldsymbol{j}\rangle\langle \boldsymbol{j}+\boldsymbol{n}\mid \boldsymbol{k}\rangle\langle \boldsymbol{k}+\boldsymbol{m}\mid \\ &= \sum_{j}\exp(\mathrm{i}A_{j,j+n})\exp(\mathrm{i}A_{j+n,j+m+n}) \mid \boldsymbol{j}\rangle\langle \boldsymbol{j}+\boldsymbol{m}+\boldsymbol{n}\mid, \end{aligned}$$

上面用到态矢的正交归一性

$$\langle \boldsymbol{j}+\boldsymbol{n}\mid \boldsymbol{k}\rangle = \delta_{k,j+n},$$

以及

$$T_m T_n = \sum_{j}\exp(\mathrm{i}A_{j,j+n})\exp(\mathrm{i}A_{j+m,j+m+n}) \mid \boldsymbol{j}\rangle\langle \boldsymbol{j}+\boldsymbol{m}+\boldsymbol{n}\mid.$$

用式(12.13.19)，注意

$$\boldsymbol{j}\times(\boldsymbol{j}+\boldsymbol{n}) + (\boldsymbol{j}+\boldsymbol{n})\times(\boldsymbol{j}+\boldsymbol{m}+\boldsymbol{n}) = \boldsymbol{j}\times(\boldsymbol{n}+\boldsymbol{m}) + \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{m},$$

于是有

$$\begin{aligned} T_n T_m &= \exp\left[\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{m})\right]\sum_{j}\exp\left[\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{j}\times(\boldsymbol{n}+\boldsymbol{m})\right]\mid \boldsymbol{j}\rangle\langle \boldsymbol{j}+\boldsymbol{m}+\boldsymbol{n}\mid \\ &= \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{m})\right]T_{n+m} = \exp\left(\frac{1}{2}\Phi\right)T_{n+m}, \end{aligned}$$

以及

$$T_m T_n = \exp\left(-\frac{1}{2}\Phi\right)T_{m+n}.$$

若令 $\boldsymbol{n}$ 沿 x 方向，$\boldsymbol{m}$ 沿 y 方向，上二式给出

$$T_x T_y = q^2 T_y T_x,$$

其中

$$q^2 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi\Phi/\Phi_0}. \tag{12.13.22}$$

式(12.13.16)因此也可以写成[55,56]

$$\begin{aligned} H &= -\mathrm{i}\sum_{\mu=\pm x,\pm y}\sum_{j}\exp(\mathrm{i}A_{j,j+\mu}) \mid \boldsymbol{j}\rangle\langle \boldsymbol{j}+\boldsymbol{\mu}\mid \\ &= T_x + T_{-x} + T_y + T_{-y}. \end{aligned} \tag{12.13.23}$$

仿照式(12.13.8)，定义(为与文献[54,55]一致，注意式(12.13.8)不是唯一的)

$$\begin{aligned} X^{+} &= \frac{1}{q-q^{-1}}(T_{-x} + T_{-y}), \\ X^{-} &= -\frac{1}{q-q^{-1}}(T_x + T_y), \\ T_{-x}T_y &= q^2 K^{-2},\ T_{-y}T_x = q^{-2}K^2, \end{aligned} \tag{12.13.24}$$

则 $X^{\pm}$ 与 $K^{\pm1}$ 满足量子代数关系式(12.12.12)，且 H 也能用量子代数生成元素表示出来：

$$H = \mathrm{i}(q - q^{-1})(X^{-} - X^{+}). \qquad (12.13.25)$$

以上讨论的例子，其基本物理内容已在凝聚态物理中有所了解，现在知道它们原来是量子代数的实现.这个新理解引起以后一系列研究工作[55,56].

本节内容请参阅文献[54,55].

12.14　相位量子化的可能性与量子代数的循环表示

在量子力学中，量子化的过程是把经典 Poisson 括号{,}换成$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}$[,]，此处[,]是量子对易子.但这个"处方"在对相位量子化时却发生了问题.在分析力学中，作正则变换后的可积系统会有作用变量 J 和与它共轭的角变量 ϕ，它们的 Poisson 括号$\{J,\phi\}=1$.在进行量子化时 $J\to\hat{N}$(粒子数)，而 $\phi\to\hat{\phi}$(位相算符).在$\hat{N}=a^{\dagger}a$ 中，右若令 $a=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{\phi}}\sqrt{\hat{N}}$，$a^{\dagger}=\sqrt{\hat{N}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\phi}}$，则会发现 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{\phi}}$并不幺正.对易关系$[\hat{N},\hat{\phi}]=\mathrm{i}$，但若对粒子数本征态$|n\rangle$作平均时却有

$$\langle n \mid [\hat{N},\hat{\phi}] \mid n\rangle = n\langle n \mid \hat{\phi} \mid n\rangle - n\langle n \mid \hat{\phi} \mid n\rangle = 0.$$

量子相位问题有许多讨论及争论.有代表性的是 Susskind-Glogower 理论与 Pegg-Barnett 理论[57,58](以下简称 S-G 理论及 P-B 理论).S-G 理论定义了不满足幺正关系的指数算符，但保持了 Bose 子数目为任意这一物理要求；而 P-B 理论则保证了指数算符的幺正性，但限制了 Bose 子填充数有最大值(实际上不再是 Bose 子).以下要证明，P-B 理论与量子代数当 $q^{P}=1$ 时的循环表示有关.事实上，本节就是通过这个例子介绍量子代数的循环表示.

将相位本征态$|\phi_m\rangle$用粒子数态$|n\rangle$展开，并规定粒子数有最高限 S，有

$$|\phi_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{S+1}}\sum_{n=0}^{S}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\phi_m}\mid n\rangle. \qquad (12.14.1)$$

为了使相位本征态有正交归一性质，即

$$\langle\phi_m \mid \phi_n\rangle = \delta_{mn}, \qquad (12.14.2)$$

相位本征值要满足

$$\phi_m = \phi_0 + \frac{2m\pi}{S+1}. \qquad (12.14.3)$$

其中 ϕ_0 为任意实数.下面演示从式(12.14.3)可以得到式(12.14.2).

$$\begin{aligned}\langle\phi_n \mid \phi_m\rangle &= (S+1)^{-1}\sum_{l,k=0}^{S}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(l\phi_m-k\phi_n)}\langle l \mid k\rangle \\ &= (S+1)^{-1}\sum_{k=0}^{S}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(\phi_m-\phi_n)} = (S+1)^{-1}\sum_{k=0}^{S}q^{k(m-n)},\end{aligned}$$

其中

$$q = \exp\left(\mathrm{i}\,\frac{2\pi}{S+1}\right),\quad q^{P}=1,\qquad P=S+1. \qquad (12.14.4)$$

它显然满足

$$\sum_{n=0}^{S}q^{n} = 0,$$

因此式(12.14.2)成立.相位算符为

$$\hat{\phi} = \sum_{m=0}^{S} \phi_m \mid \phi_m \rangle \langle \phi_m \mid. \tag{12.14.5}$$

将 $e^{i\hat{\phi}}$ 作用于 $|n\rangle$，有

$$\begin{aligned} e^{i\hat{\phi}} \mid n\rangle &= (S+1)^{1/2} \sum_{m=0}^{S} e^{-in\phi_m} e^{i\hat{\phi}} \mid \phi_m\rangle \\ &= (S+1)^{1/2} \sum_{m=0}^{S} e^{-i(n-1)\phi_m} \mid \phi_m\rangle. \end{aligned}$$

将上式与式(12.14.1)比较，可知

$$e^{i\hat{\phi}} \mid n\rangle = \mid n-1\rangle, \quad n \geqslant 1, \tag{12.14.6}$$

但如果 $n=0$，却有

$$\begin{aligned} e^{i\hat{\phi}} \mid 0\rangle &= (S+1)^{-1/2} \sum_{m=0}^{S} e^{i\phi} \mid \phi_m\rangle \\ &= (S+1)^{-1/2} \sum_{m=0}^{S} e^{i(S+1)\phi_0} e^{-iS\phi_m} \mid \phi_m\rangle \\ &= e^{i(S+1)\phi_0} \mid S\rangle. \end{aligned} \tag{12.14.7}$$

算符 $e^{i\hat{\phi}}$ 本是减少粒子数的，但它作用于 $|0\rangle$ 却不为 0，而是给出最高的粒子数态 $|S\rangle$. 总结以上结果如下：

$$\left.\begin{aligned} e^{i\hat{\phi}} \mid n\rangle &= \mid n-1\rangle, \quad n \neq 0, \\ e^{i\hat{\phi}} \mid 0\rangle &= e^{i(S+1)\phi_0} \mid S\rangle, \\ e^{-i\hat{\phi}} \mid n\rangle &= \mid n+1\rangle, \quad n \neq s, \\ e^{-i\hat{\phi}} \mid S\rangle &= e^{-i(S+1)\phi_0} \mid 0\rangle, \end{aligned}\right\} \tag{12.14.8}$$

$$e^{i\hat{\phi}} e^{-i\hat{\phi}} = e^{-i\hat{\phi}} e^{i\hat{\phi}} = 1. \tag{12.14.9}$$

需要强调，式(12.14.9)不是显然的，它的成立是以存在粒子数最高值为代价的. 这一点是和存在粒子数最低值 0 相联系的. 如果只有最低值而无最高值，则若 $e^{i\hat{\phi}}|0\rangle=0$，$e^{-i\hat{\phi}}e^{i\hat{\phi}}$ 作用于 $|0\rangle$ 显然不等于 $e^{i\hat{\phi}}e^{-i\hat{\phi}}|0\rangle$. 有了最低值，设定最高值，式(12.14.8)，(12.14.9)便是自洽的操作. 若将 n 的值在展开(12.14.1)式中取为 $-\infty$ 至 $+\infty$，就不会发生困难，但要解释负 n 值的意义，例如有的工作将负 n 值解释为带负电的粒子，作成等效理论. 算符 $e^{i\hat{\phi}}$ 及 $e^{-i\hat{\phi}}$ 的作用示于图 12.6.

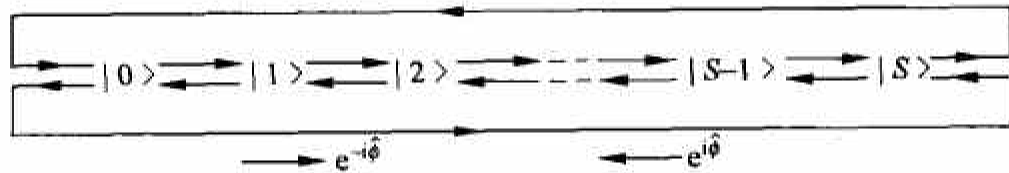


图 12.6 算符 $e^{-i\hat{\phi}}$ 及 $e^{i\hat{\phi}}$ 作用于粒子态

以上介绍的基本上是 P-B 理论的内容. 下面用另一种语言描述，说明 P-B 理论与量子代数循环表示的关系[59]，定义算符

$$q^{\hat{N}} \mid n\rangle = q^{n+\eta} \mid n\rangle, \tag{12.14.10}$$

η 为任意复数,式中 q 满足 $q^{S+1}=1$. 根据式(12.14.10)以及式(12.14.8),有

$$e^{i\hat{\phi}} q^{\hat{N}} \mid n\rangle = q^{n+\eta} e^{i\hat{\phi}} \mid n\rangle = \begin{cases} q^{\eta} e^{i(S+1)\phi_0} \mid S\rangle, & n = 0, \\ q^{n+\eta} \mid n-1\rangle, & n \neq 0; \end{cases}$$

$$q^{\hat{N}} e^{i\hat{\phi}} \mid n\rangle = \begin{cases} q^{\eta} e^{i(S+1)\phi_0} q^{-1} \mid S\rangle, & n = 0, \\ q^{n+\eta} q^{-1} \mid n-1\rangle, & n \neq 0. \end{cases}$$

二者相比给出

$$e^{i\hat{\phi}} q^{\hat{N}} = q q^{\hat{N}} e^{i\hat{\phi}}. \tag{12.14.11}$$

类似地还可证明

$$q^{\hat{N}} e^{-i\hat{\phi}} = q e^{-i\hat{\phi}} q^{\hat{N}}. \tag{12.14.12}$$

以上二式导致 $e^{-i\hat{\phi}} e^{i\hat{\phi}} = e^{i\hat{\phi}} e^{-i\hat{\phi}} = 1$,与式(12.14.9)同. 定义算符

$$\left.\begin{aligned} a^{\dagger} &= [\hat{N}]^{1/2} e^{-i\hat{\phi}}, \\ a &= e^{i\hat{\phi}} [\hat{N}]^{1/2}, \end{aligned}\right\} \tag{12.14.13}$$

其中

$$[\hat{N}] = \frac{q^{\hat{N}} - q^{-\hat{N}}}{q - q^{-1}}. \tag{12.14.14}$$

从式(12.14.13)有

$$e^{i\hat{\phi}} = a[\hat{N}]^{-1/2}, \qquad e^{-i\hat{\phi}} = [\hat{N}]^{-1/2} a^{\dagger}. \tag{12.14.15}$$

从式(12.14.13)及式(12.14.15)得

$$a^{\dagger} a = [\hat{N}], \qquad a a^{\dagger} = [\hat{N}+1], \tag{12.14.16}$$

其中 $aa^{\dagger}$ 的计算需要 $q^{-N} e^{-i\hat{\phi}} = q^{-1} e^{-i\hat{\phi}} q^{-\hat{N}}$,它由式(12.14.11)以及 $e^{i\hat{\phi}} = (e^{-i\hat{\phi}})^{-1}$ 得到. 直接计算 $a, a^{\dagger}$ 的对易关系,得

$$a a^{\dagger} - q a^{\dagger} a = [\hat{N}+1] - q[\hat{N}] = \frac{q^{-\hat{N}+1} - q^{-\hat{N}-1}}{q - q^{-1}} = q^{-\hat{N}},$$

即

$$\begin{aligned} a a^{\dagger} - q a^{\dagger} a &= q^{-\hat{N}}, \\ a a^{\dagger} - q^{-1} a^{\dagger} a &= q^{\hat{N}}. \end{aligned} \tag{12.14.17}$$

从式(12.14.15)及式(12.14.8)得到

$$\left.\begin{aligned} & a \mid n\rangle = ([n+\eta])^{1/2} \mid n-1\rangle, n \neq 0, \\ & a \mid 0\rangle = [\eta]^{1/2} e^{i(S+1)\phi_0} \mid S\rangle, \\ & a^{\dagger} \mid n\rangle = ([n+\eta+1])^{1/2} \mid n+1\rangle, n \neq S, \\ & a^{\dagger} \mid S\rangle = ([\eta])^{1/2} e^{-i(S+1)\phi_0} \mid 0\rangle, \\ & q^{S+1} = 1. \end{aligned}\right\} \tag{12.14.18}$$

$[\hat{N}]$的本征值是

$$[\hat{N}] \mid n\rangle = \frac{q^{n} - q^{-n}}{q - q^{-1}} \mid n\rangle \equiv [n] \mid n\rangle. \tag{12.14.19}$$

a 及 $a^\dagger$ 在粒子态上的作用示于图 12.7.

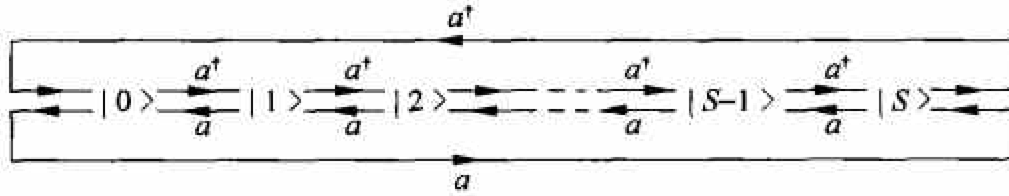


图 12.7　算符 $a, a^\dagger$ 作用于粒子态

由于 $q^{S+1}=1$,P-B 理论实际定义了 q 变形 Bose 算符,它们由态 $|n\rangle$ 提供了循环表示,态的数目为 $S+1$.

q 变形的 Bose 表示(式(12.14.17))是量子代数的一种实现. 孙昌璞、傅洪忱[60]、Biedenharn[61] 和 Macfarlane[62] 曾独立作出证明. 设有两种 q 变形的 Bose 子,它们的算符彼此对易,又各自遵守对易关系(式(12.14.17)):

$$\left.\begin{aligned} a_i a_i^\dagger - q a_i^\dagger a_i &= q^{-\hat{N}_i}, \\ a_i a_i^\dagger - q^{-1} a_i^\dagger a_i &= q^{\hat{N}_i}; \end{aligned}\right\} \tag{12.14.20}$$

此处以 $i=1,2$ 区别这两种 Bose 子. 用 $a_i, a_i^\dagger$ 可以组成 q 变形的 $SL(2)$ 算符:

$$X^+ = a_1^\dagger a_2, \quad X^- = a_2^\dagger a_1, \quad J_3 = \frac{1}{2}(\hat{N}_1 - \hat{N}_2), \quad K = q^{J_3}. \tag{12.14.21}$$

用对易关系(式(12.14.17))可得 X^+, X^- 的对易关系:

$$\begin{aligned} [X^+, X^-] &= a_1^\dagger a_2 a_2^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_1 a_1^\dagger a_2 \\ &= a_1^\dagger a_1 (q a_2^\dagger a_2 + q^{-\hat{N}_2}) - a_2^\dagger a_2 (q a_1^\dagger a_1 + q^{-\hat{N}_1}) \\ &= [\hat{N}_1] q^{-\hat{N}_2} - [\hat{N}_2] q^{-\hat{N}_1} \\ &= \frac{q^{(\hat{N}_1 - \hat{N}_2)} - q^{-(\hat{N}_1 - \hat{N}_2)}}{q - q^{-1}} = \frac{q^{2J_3} - q^{-2J_3}}{q - q^{-1}} \\ &= \frac{K^2 - K^{-2}}{q - q^{-1}}. \end{aligned} \tag{12.14.22}$$

这正是量子代数 $U_q(SL(2))$ 的对易关系. 因此,P-B 理论涉及的是一类 q 变形 Bose 子的循环表示. 量子代数的引入是与 XXZ 模型相联系的,在那里 q 变形是由 $S_i^3 S_{i+1}^3$ 相互作用所引起. 在 12.13,12.14 节的例中,q 是由外磁场引起的. 从以上的例子看出,用 Bose 表示处理量子代数更直观和有效. 一个有趣的问题是:如果在 P-B 理论中令 $S\to\infty$,结果是否会和 S-G 理论一样呢? 对这个问题藤川和男[63]的答案是:即使在 P-B 理论中令 $S\to\infty$,它的拓扑性质也和 S-G 理论不同,即它们是本质上不同的理论. 在量子场论中一种正规化的方法是先固定一个量 Λ,最后再令它趋于无穷,即 $\Lambda\to\infty$. 循环表示的物理本性在 $S\to\infty$ 时也和不设上限的理论不同. 对正规化理论应如何认识呢?

本节讨论的位相量子化方案只是众多理论中的一个. 关于这个问题还存在许多不同的观点,有些甚至是对立的. 从量子力学角度,我们关心的是位相差,而不是位相的绝对值,因此事实上只要量子化位相差就可以了. 还有一种观点认为位相根本不需要用本节的方式量子化,澄清有关争论还需要更深入的研究. 有关量子代数的文献可参阅文献[64,65],有关的物理含义可参阅文献[66].

参考文献

[1] Faddeev L D. *Integrable Models in* 1+1 *Dimensional Quantum Field Theories*, Les Houches Lectures 1982. Amsterdam: Elsvier, 1984.

[2] Faddeev L D. Lectures on Quantum Inverse Scattering Method. Song X C, ed. Nankai Lectures on Mathematical Physics 1987. Singapore: World Scientific, 1992.

[3] Kulish P P, Sklyanin E K. Lecture Notes in Physics. Springer, 1982, 151: 61.

[4] Yang C N. Phys Rev Lett, 1967, 19: 1312.

[5] Yang C N. Phys Rev, 1968, 168: 1920. Zamoldchikov and Zamolodchidov A B. Ann Phys, 1979, 120: 253.

[6] Drinfeld V G. Soviet Math Dokl, 1985, 22: 254; 1988, 36: 212.

[7] Drinfeld V G. Quantum Groups. In: Proc. Intern. Congress of Mathematicians. Gleason AM ed. Berkeley, USA, 1986. American Mathematical Society, 1987. 269-291.

[8] Baxter R J. Exactly Solved Methods in Statistical Mechanics. London: Academic Press, 1982.

[9] Sklyanin E K, Ge M L, Zhao B H. eds. Quantum Groups and Quantum Integrable Systems. Nankai Lectures on Mathematical Physics. Singapore: World Scientific, 1991.

[10] Shnider S, Sternberg S. Quantum Groups. Lieb E, ed. International press, 1991.

[11] Majid S. Foundations of Quantum Group Theory. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.

[12] Chari V, Pressley A. A Guide to Quantum Groups. Cambridge: Cambridge University Press.

[13] Chaichian M, Demichev A. Introduction to Quantum Groups. Singapore: World Scientific, 1998.

[14] Klimyk A, Schmudgen K. Quantum Groups and Their Representations. Texts and Monographs in Physics. Series Editors: R Balian # R, Lieb E, Reshetichin N, Thirring W. Springer, 1997.

[15] Biedenharn L C, Lohe M A. Quautum Group Symmehy and q-Tensor Algebras. Singapore: World Scientific, 1995.

[16] Kauffman L H. Knots and Physics. Singapore: World Scientific, 1991.

[17] Jimbo M. Quantum Groups and Yang-Baxter Equations. (in Japanese) Tokyo: Springer, 1991.

[18] Kulish P P. Quantum Groups. Lecture Notes in Mathemaics. Springer-Verlag, 1992.

[19] Yang C N, Ge M L. Braid Group, Knot Theory and Statistical Mecharics. Singapore: World Scientific, 1989.

[20] Yang C N, Ge M L. Braid Group, Knot Theory and Statistical Mecharics Ⅱ. Singapore: World Scientific, 1994

[21] Ma Z Q. Yang-Baxter Equation and Quantum Enveloping Algebras. Singapore: World Scientific.

[22] Ge M L, Xue K. Yang-Baxter Equation. Shanghai: Shanghai, Scientific & Technical Pub., 1999. Yang-Baxter Equation in Quantum Mechanics. Shanghai: Shanghai, Scientific and Technological Education Pub. House, 1998.

[23] Nankai Symposium. Introduction to Quantum Groups and Integrable Mossive Models of quantum Field Theory. Ge M L, Zhao B H, eds. Singapore: World Scientific, 1990.

[24] Nankai Symposium. Quantum Groups and Quantum Integrable Systems. Ge M L, ed. Singapore: World Scientific, 1992.

[25] Nankai Symposium. New development of Integrable Systems and Long-Ranged Interaction Modles. Ge M L, Wu Y S, eds. Singapore: World Scientific, 1995.

[26] Nankai Symposium. Quantum Groups, Integrable Statisfical Models and Knot Theory. Ge M L, De Vega H J, eds. Singapore: World Scientific, 1993.

[27] Lipatov L N. Talkat Nankai Symposium. Tianjin: Nankai University, 1994.

[28] Ge M L, Xue K, Cho Y M. Phys Lett, 1999, A260: 484.
[29] Bai C M, Ge M L, Xue K. J Stat Phys, 2001, 102: 545.
[30] Wang Z F, Ge M L, Xue K. J Phys, 1997, A30: 5023.
[31] Wu T T, Yang C N. Phys Rev, 1975, D12: 3845; Nucl. Phys. 1976, B107: 365.
[32] Balian R, Werthamer N R. Phys Rev, 1963, 131: 1553.
[33] Lee D M. Rev Mod Phys, 1997, 69: 645.
[34] Leggett A J. Rev Mod Phys, 1975, 47: 331.
[35] Anderson P W, Morel P. Phys Rev, 1961, 123: 1911.
[36] Belavin and Drinfeld V G. Functional Analysis and Its Applications. Springer, 1982, 16: 159.
[37] Jones V. F. r. Commun. Math. Phys. 1987, 125: 459. Kauffman L. H., see [16]; Wadati M. see [19]; Kohon T. see [19].
[38] Takhtajan L. Letures on Quantum Groups. In [23].
[39] Bashanov V V, Stroganov Yu G. see [17].
[40] Jimbo M. Lett. Math. Phys. 1985, 10: 63; 1986, 11: 247. Commun Math. Phys. 1986, 102: 537.
[41] De Vega H J. Int J Mod Phys, 1989, A4: 237; 1989, A5: 1611.
[42] Wiegmann P B, Zabrodin A Z. Phys Rev Lett, 1994, 73: 1134.
[43] Chen G H, Kung L M, Ge M L. Phys Rev, 1996, B53: 9540; Chen G H, Ge M L. Phys Rev, 1996, B54: 7654.
[44] Hatsugai Y, Kohmoto M, Wu Y S. Phys Rev Lett, 1994, 73: 1134.
[45] Pegg D T, Barnett S M. Phys Rev, 1989, A39: 1665; Barnett S M, Pegg D T J. Mod. Opt 1989, 36: 7.
[46] De Concini, Kac V G. Gollooque Dixmier. Progress in Math, 92, 471, 1990. Jimbo M. Topics from Representations of Uq(g)—An Introduction Guide to Physicists. In [24].
[47] Sun C P, Ge M L. q-Boson realization theory of quanhtum algebras and its applications to YBE. In [24].
[48] Sun C P, Fu H C. J Phys, 1989, A22: L983.
[49] Bledenharn L C. J Phys, 1989, A22: L873.
[50] Macfarlam A J. J Phys, 1989, A22: 4581.
[51] Fujikawa K. Phys Rev, 1995, A52: 3299.
[52] Vorontsov Yu I. Physics-Vspekhi, 2002, 45(8): 907.
[53] Jimbo M. Yang-Baxter Equation in Integrable Systems. Singapore: World Scientific, 1990
[54] Wiegmann P B, Zabrodin A Z. Phys Rev Lett, 1994, 72: 1890
[55] Hatsugai Y, Kohmoto M, Wu Y S. Phys Rev Lett, 1994, 73: 1134
[56] Chen G H, Ge M L. Phys Rev, 1996, B 54: 7654;
Chen G H, Kuang L M, Ge M L. Phys Rev, 1996, B 53: 9540
[57] Susskind L, Glogower J. Physics, 1964, 1: 41
[58] Pegg D T, Barnett S M. Phys Rev, 1989, A 39: 1665
[59] 孙昌璞. 量子代数的 q 变形玻色子实现理论及其对杨-Baxter方程的应用. 天津：南开大学, 1992
[60] Sun C P, Fu H C. J Phys, 1989, A 22: L983
[61] Biedenharn L C. J Phys, 1989, A 22: L873
[62] Macfarlane A J. J Phys, 1989, A 22: L4581
[63] Fujikawa K. Phys Rev, 1995, A 52: 3299
[64] 马中骐. 杨-巴克斯特方程和量子包络代数. 北京：科学出版社, 1993
[65] Chari V, Pressley A. A Guide to Quantum Groups. Combridge: Cambridge Univ. Press, 1994
[66] 葛墨林, 薛康. 杨-巴克斯特方程. 上海：上海科技出版社, 1999

名 词 索 引

（先按字母 A～Z 排列，然后按书中出现的先后次序排列）

[General Information]
书名=量子力学的前沿问题　第2版
作者=张礼，葛墨林编著
页数=507
SS号=13042734
出版日期=2012.03
出版社=2012.03